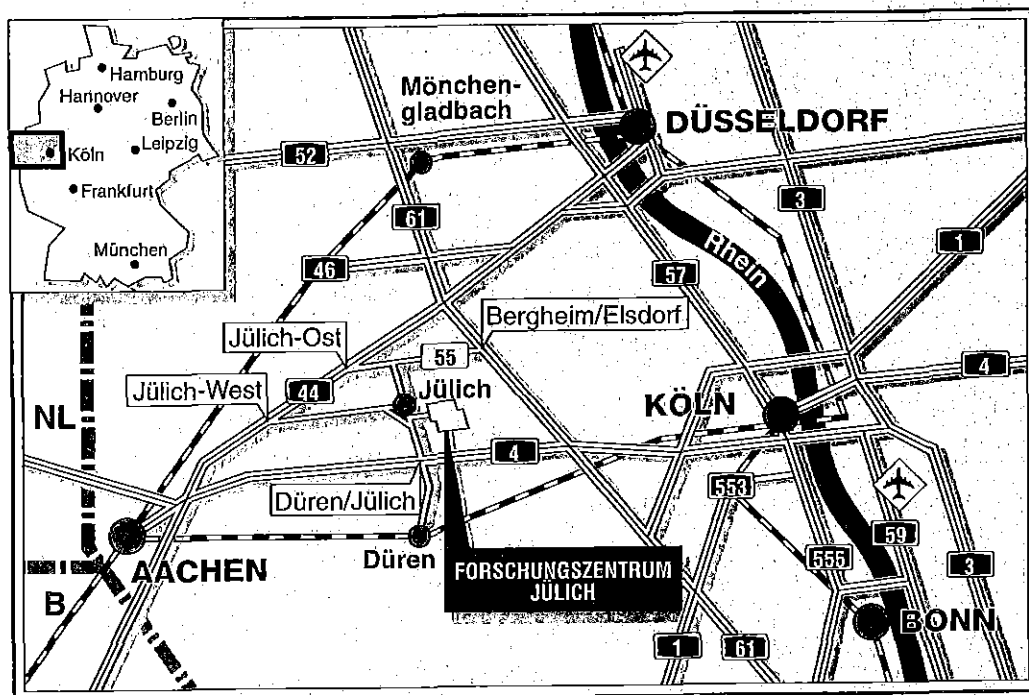


Höchstleistungsrechenzentrum

Rohrfluß granularer Materie: Theorie und Simulationen

Jochen Schäfer



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3214

ISSN 0944-2952

Höchstleistungsrechenzentrum Jülich-3214

D 464 (Diss. Universität-GH-Duisburg)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-61 02 · Telefax: 02461/61-61 03 · Telex: 833556-70 kfa d

Rohrfluß granularer Materie: Theorie und Simulationen

Jochen Schäfer

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Eigenschaften granularer Materie	3
1.1 Phänomenologie	3
1.1.1 Dilatanz	3
1.1.2 Gewölbebildung	5
1.1.3 Fluidisierung und Konvektion	6
1.1.4 Inelastische Mikrostruktur	7
1.1.5 Selbstorganisation	8
1.1.6 Größensegregation	9
1.1.7 Weitere Eigenschaften	10
1.2 Makromechanik	11
1.2.1 Berechtigung der Kontinuumsbeschreibung	12
1.2.2 Klassifizierung der Flußformen	12
1.2.3 Kontinuumstheorien und kinetische Theorien	13
1.2.4 Stoffgleichungen für granulare Materialien	14
1.2.5 Diskussion	15
1.3 Mikromechanik der Teilchenkollision	16
1.3.1 Beschreibung der Stoßgeometrie	16
1.3.2 Frontale Kollisionen	17
1.3.3 Schiefe Kollisionen	20
1.3.4 Diskussion	23
2 Simulationsmethoden	25
2.1 Ereignisgesteuerte (ED-) Molekulardynamik	26
2.1.1 Der Kollisionsoperator	26
2.1.2 Die Kollisionszeit	27
2.1.3 Intrinsische Probleme: Zenon-Effekt	29
2.2 Zeitschrittgesteuerte (TD-) Molekulardynamik	30
2.2.1 Prädiktor-Korrektor-Verfahren	30
2.2.2 Kontaktkräfte	32
2.2.3 Intrinsische Probleme: <i>Detachment</i> , Bremsversagen	33
2.3 Hybridmethoden	38

3	Methodische Aspekte der TD-Simulation	39
3.1	Normalkräfte	39
3.1.1	Allgemeine dissipative Rückstellkraft	39
3.1.2	Harmonische Rückstellkraft mit Dämpfung	41
3.1.3	Hertzsche Rückstellkraft	41
3.1.4	Hertzsche Rückstellkraft mit Dämpfung	42
3.1.5	Plastische Rückstellkraft	43
3.1.6	Vergleich der Kraftgesetze und Diskussion	43
3.2	Tangentialkräfte	46
3.2.1	Gleitreibung	46
3.2.2	Viskose Reibung	47
3.2.3	Regularisierte Gleitreibung	47
3.2.4	Lineare Tangentialfeder	48
3.2.5	Variable Tangentialfeder	50
3.2.6	Sägezahnkraft	51
3.2.7	Kombinationen mit anderen Rückstellkräften	51
3.2.8	Diskussion	54
3.3	Wechselwirkung mit einer rauhen Wand	55
4	Einfache Theorie des homogenen Flusses	59
4.1	Vorbemerkungen	60
4.1.1	Zur Annahme der Homogenität	60
4.1.2	Definition des Systems	61
4.2	Herleitung der Gleichungen	62
4.2.1	Änderungsrate der mittleren Axialgeschwindigkeit	63
4.2.2	Änderungsrate der thermischen Geschwindigkeit	63
4.3	Auswertung der Gleichungen	66
4.3.1	Stationäre Zustände, Reduktion	66
4.3.2	Stabilität der stationären Zustände	67
4.3.3	Gültigkeitsbereich	67
4.3.4	Erweiterung zu höheren Dichten	68
4.3.5	Diskussion	70
4.4	Transienten	71
4.4.1	Anpassung der freien Parameter	71
4.4.2	Oszillatorische Relaxation und Fluktuationen	74
4.4.3	Abweichungen vom mittleren Systemverhalten	76
4.5	Stationäre Zustände	77
4.5.1	v_s als Funktion von W und η	80
4.5.2	σ_s als Funktion von W und η	83
4.5.3	v_s und σ_s als Funktion von e_n	84
4.5.4	v_s und σ_s als Funktion der Wandrauhigkeit	84
4.5.5	Das Verhalten realistischer Systeme	85

5 Simulationen zum nichthomogenen Fluß	89
5.1 Validität und Anwendbarkeit von Simulationen	89
5.1.1 Bistabilität durch Bremsversagen	89
5.1.2 Ein „Phasendiagramm“ zur Anwendbarkeit	92
5.2 Breite Systeme: Radiale Struktur	93
5.3 Dichte Systeme: Erzwungene Ordnung	95
5.4 Inelastische Systeme: Teilchenpaare	98
5.5 Lange Systeme: Dichtewellen	101
5.5.1 Kinematische Wellen	102
5.5.2 Stationäre und dynamische Fundamentaldiagramme	103
5.5.3 Globales Fundamentaldiagramm	106
5.5.4 Diskussion	110
Zusammenfassung und Ausblick	111
Literaturverzeichnis	113
Anhang: Vorabveröffentlichungen	129

Einleitung

Der Begriff granulare Medien bezeichnet eine sehr allgemeine Stoffklasse von großer Bedeutung in Industrie und Alltag: Ansammlungen fester, unterscheidbarer Teilchen. Dazu zählen – als mengenmäßig bedeutsamstes Beispiel – Sand genauso wie Pulver oder Geröll, alltägliche Produkte wie Reis oder Mehl genauso wie beispielsweise die Ringe des Saturn.

Es gibt kaum einen verfahrenstechnischen Prozeß, in dem nicht in der einen oder anderen Form granulare Materialien zu transportieren oder zu verarbeiten wären [1, 2]. Das Spektrum der großindustriellen Anwendungen granularer Materialien reicht von der Verarbeitung ganzer Felsbrocken bei der Erzgewinnung über die Herstellung von Lebensmittelgranulaten in Wirbelstromagglomeratoren bis zur Beimischung sehr feiner Pulver bei der Herstellung von Autoreifen. Schätzungen zufolge liegen in der chemischen Industrie gewichtsmäßig etwa 75 % aller Rohmaterialien in granularer Form vor [2]; ähnliches dürfte für die Lebensmittelindustrie und die Bauindustrie gelten. Die ökonomische Bedeutung granularer Materie liegt also auf der Hand. Die Geologie interessiert sich dagegen für natürliche Lagerstätten granularer Medien (z.B. Wüsten oder Strände) und Phänomene wie Erosion, Sedimentation, Lawinen, Erdbeben, in denen granulare Materialien eine Rolle spielen [3]. Daß auch diese nicht allein von wissenschaftlichem Interesse sind, mag die Tatsache verdeutlichen, daß allein in den USA jährlich eine Milliarde Dollar für die Pflege und Bewahrung von Stränden ausgegeben werden [4] oder daß Wüstenausbreitung und Erosion bekanntlich ganze Landstriche bedrohen.

In dieser Arbeit werden Flüsse granularer Medien behandelt, speziell solche, in denen das sogenannte interstitielle Medium (zumeist Luft oder Wasser) einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Bewegung der Körnchen hat. Im allgemeinen ist diese Voraussetzung umso besser erfüllt, je größer die Körnchen sind; für die Zwecke dieser Arbeit ist mittelmäßig grober Sand, wie man ihn beispielsweise an einem Strand findet, ein gutes Beispiel. Bei der untersuchten Geometrie handelt es sich um einen zweidimensionalen granularen Fluß durch ein Rohr, dessen Wände durch Bekleben mit Körnchen aufgerauht sind. Eine solche Geometrie eignet sich besonders gut für Simulationen und ist auch bereits in mehreren Experimenten verwirklicht worden [5–8].

Die verwendeten Untersuchungsmethoden sind ein einfacher analytischer Ansatz auf der einen Seite und numerische Simulationsrechnungen auf der anderen Seite. Die entsprechenden Programme sind alle vom Autor selbst in FORTRAN geschrieben worden. Sie umfassen unterschiedliche Einheiten wie Initialisierungsprogramme, Produktionsprogramme, Auswertprogramme, Visualisierungsprogramme sowie Verwaltungsprogramme und liefen erfolgreich auf den UNIX-Umgebungen der Workstation-Cluster in Duisburg und

im HLRZ Jülich.

Die Arbeit ist in der folgenden Weise gegliedert: Eine allgemeine Einführung in die Eigenschaften granularer Materie wird im ersten Kapitel gegeben. Im zweiten Kapitel folgt ein Abriß der verwendeten Simulationsmethoden, mit einer vertiefenden Diskussion methodischer Aspekte im dritten Kapitel. Eine einfache Theorie des verdünnten, homogenen granularen Rohrflusses wird im vierten Kapitel vorgestellt und mit Simulationen verglichen, bevor im fünften Kapitel der allgemeine Fall des nichthomogenen granularen Rohrflusses durch Simulationen erforscht wird. Die Arbeit endet mit einer kritischen Zusammenfassung der Ergebnisse und einem Ausblick.

Kapitel 1

Eigenschaften granularer Materie

Granulare Materialien unterscheiden sich in ihren mikroskopischen Eigenschaften, also der Wechselwirkung der einzelnen Körnchen, durch drei grundlegende Besonderheiten von Ansammlungen molekularer oder atomarer Teilchen:

- Zwischen den Körnchen gibt es Kontaktwechselwirkung, also eine „harte“ repulsive Wechselwirkung, die zu Volumenausschluß führt.
- Sowohl durch *inelastischen Stoß* als auch durch *reibenden Kontakt* kann kinetische Energie der Relativbewegung unwiederbringlich in Energie der inneren Freiheitsgrade der Körner, also Wärme, dissipiert werden.
- Zwischen zwei zusammengepreßten Körnern kann Haftreibung auftreten (d.h. es ist eine endliche Scherkraft notwendig, um den Kontakt zu trennen).

Alle makroskopischen Eigenschaften von granularer Materie lassen sich letztlich auf diese mikroskopischen Besonderheiten zurückführen.

1.1 Phänomenologie

1.1.1 Dilatanz

Ein und derselbe Sandboden kann je nach Präparation sehr unterschiedliche Eigenschaften aufweisen. Ist er locker aufgeschüttet, sinkt man beim Darauftreten leicht bis zum Knöchel ein; wurde er dagegen festgestampft oder auf andere Weise verdichtet, ist er äußerst tragfähig und gibt bei Belastung kaum nach. Bei Immersion in Wasser reicht die Palette der Erscheinungsformen von extrem festen Sandstränden bis hin zu Treibsänden, mit nur geringem Unterschied in der Packungsdichte (was Treibsände so trügerisch und gefährlich macht). Diese starke Abhängigkeit der Eigenschaften von der Packungsdichte findet ihre Erklärung in einem Prinzip, das als *Dilatanz* bekannt ist und von Reynolds¹

¹Osborne Reynolds (1842–1912) forschte hauptsächlich über Fluidodynamik. Daneben untersuchte er auch granulare Flüsse und war gegen Ende seines Lebens so von diesem Thema eingenommen, daß er

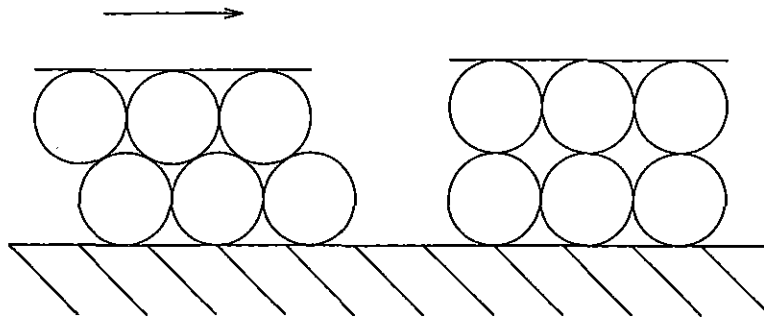


Abbildung 1.1: Skizze zur Dilatanz.

1885 formuliert wurde [9]: *Ein dichtgepacktes granulares Material läßt sich nur unter Volumenvergrößerung verformen.* Dies gilt für Packungsdichten oberhalb einer bestimmten kritischen Dichte, der Dilatanzgrenze.² Der mikroskopische Grund für Dilatanz ist in Abb. 1.1 veranschaulicht: Um die obere Schicht aus dem Anfangszustand an der unteren Schicht „vorbeizuscheren“, muß sie zunächst um ein Stück angehoben werden.³ Zwei einfache Experimente können dazu dienen, Dilatanz anschaulich zu machen.

- Eine ungeöffnete, vakuumversiegelte Packung mit Pulverkaffee ist hart und nicht verformbar; nimmt man dagegen den Atmosphärendruck von der Packung (durch Perforieren der Hülle), so wird das Pulver weich und läßt sich verformen.
- Ein mit Sand gefüllter und verschlossener Gummiballon ist weich und verformbar; wirft man ihn kräftig gegen eine glatte Fläche, so wird das Material fest, und die granulare Packung hat trotz der elastischen Rückstellkräfte der Gummimembran eine platte Form.

In beiden Fällen verhindern die durch die Wand vermittelten komprimierenden Kräfte eine für die Verformung der Packung notwendige Ausdehnung des Materials. Die Dilatanz erklärt auch das intuitiv unverständliche Phänomen, daß Fußabdrücke auf einem wassergetränkten Sandstrand sich nicht mit Wasser füllen, sondern im Gegenteil trockener als ihre Umgebung sind: Die über den Fuß vermittelte Gewichtskraft induziert eine Scherung im unterliegenden granularen Material, die zu einer lokalen Volumenvergrößerung führt. Daher erhöht sich der Lückengrad der Packung, und der Wasserspiegel sinkt lokal ab. Besonders eindrucksvoll ist die extreme Abhängigkeit der Eigenschaften eines granularen Mediums von seiner Packungsdichte durch folgendes Experiment zu demonstrieren (in abgewandelter Form schon 1931 von Jenkin geschildert [11]): Eine weithalsige Flasche wird mit Sand gefüllt und ein Besenstiel in den Sand gesteckt. Er läßt sich leicht wieder aus dem Sand herausziehen. Erlaubt man jedoch dem Sand eine leichte Verdichtung durch Klopfen an die Flasche, so wird beim Versuch, den Besenstiel aus dem Sand zu ziehen, die ganze Flasche mitangehoben; sie läßt sich am Besenstiel regelrecht umhertragen. Hier hat eine

in seinem letzten Buch (*The Sub-Mechanics of the Universe*, 1903) eine Äthertheorie formulierte, die auf Körnchen des Durchmessers 5.534×10^{-20} m basiert.

²Es gibt Hinweise, daß die Dilatanzgrenze bei der geometrisch bestimmten Packungsdichte der „zufälligen losen Packung“ liegt [10].

³Aus der Abbildung wird auch die Existenz eines verwandten Effekts, der Kontraktanz, ersichtlich: Nach Umkehr der Verformungsrichtung wird anfangs eine Verdichtung beobachtet.

geringe Veränderung der Dichte eine große Änderung der Systemeigenschaften hervorgerufen: Der verdichteten Sandfüllung ist es nicht mehr möglich, die zur Scherung des Materials notwendige Volumenausdehnung zu vollziehen, so daß eine Scherung unterbunden wird – der Besenstiel steckt, vermittelt durch Haftreibung, fest.

1.1.2 Gewölbebildung

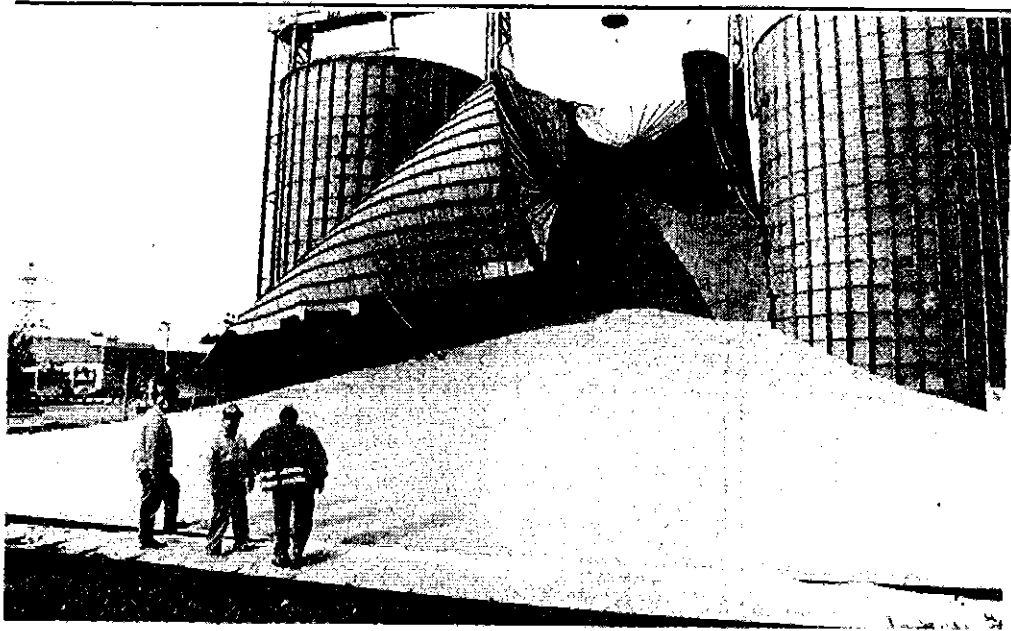
Jeder kennt die äquidistanten Minutenstriche auf der Eieruhr – eigentlich sind sie ein Grund zum Wundern und legen die Frage nahe, ob denn der Bodendruck im Gefäß und daher die Fließrate nicht, wie bei Flüssigkeiten, linear mit der Füllhöhe zunehme. Messungen in Gefäßen von der Größe einer Eieruhr bis hin zu Großsilos zeigen, daß dies in der Tat nicht so ist: Der Bodendruck p steigt nur für ganz geringe Füllhöhen h mit h an; nach einer Weile bleibt er konstant, unabhängig von h [12, 13]. Einer der frühesten Versuche, der dieses Verhalten zeigte, wurde 1852 von Hagen durchgeführt [14].

Die Erklärung für das Phänomen lautet, daß sich im Gefäß zufällig gewölbeartige Anordnungen von Körnchen ergeben, die ihre Gewichtskraft und die der darüberliegenden Körnchen dann also nicht dem darunterliegenden Material, sondern, vermittelt über die Reibung, der Wand mitteilen. Auf der Basis dieser Annahme hat es zahlreiche Versuche einer theoretischen Herleitung der experimentellen $p(h)$ -Kurve gegeben, von Hagens Erklärung über die klassische Überlegung von Janssen 1895 [15] bis zur neueren, verbesserten Analyse von Cowin 1977 [16]. Auf der anderen Seite müssen Gewölbe sich nicht grundsätzlich *nach unten* hin an der Wand abstützen; welchen Spannungszustand ein Gewölbe hat, läßt sich ihm nicht ansehen (hyperstatischer Zustand) und ist eine Folge der konkreten Situation, aus der es heraus entstanden ist. Bodendrucke in Silos können also auch extrem von der Befüllungsmethode abhängen; eine Tatsache, die schon Hagen bekannt war, weshalb er für seine Versuche eine standardisierte Methode der Befüllung entwickelte. Erlaubt man dem Material in einem Silo leichte Verdichtung durch Klopfen an die Silowand, können statische Bodendrucke weit über dem „hydrostatischen“ Druck auftreten, der ganz ohne Gewölbe herrschte [17].

Hagen maß auch die Flußrate Φ durch kreisförmige Öffnungen des Radius r im Boden von Silos und stellte fest, daß $\Phi \propto (r - \alpha)^{5/2}$ ist, wobei $(r - \alpha)$ ein effektiver Öffnungsradius ist. Diese Formel ist unzählige Male bestätigt worden; die Tatsache, daß α nichtverschwindende Werte hat, ist ebenfalls auf Gewölbebildung zurückzuführen [12, 18, 19].

In fließenden granularen Medien entstehen und vergehen Gewölbe laufend. An den Stellen, wo besonders stabile Gewölbe spontan entstehen, bleibt das ganze Material mitunter plötzlich stecken.⁴ Es ist leicht einzusehen, daß es in einer solchen Situation zu einer plötzlichen und räumlich konzentrierten Spannungszunahme an den Silowänden kommen muß; diese Spitzenspannungen können zehn bis zwanzigmal über den in statischen Situationen gemessenen Spannungen liegen [16]. Dies mag illustrieren, welche Schwierigkeiten

⁴Noch 1945 (im Jahre des Baus der ersten Atombombe!) schilderten Wolf und v. Hohenleiten [20], wie man solche Stausituationen wieder auflöst: „... by employing air lances and some judicious pounding at points where such stoppages occurred“. An dieser Situation hat sich bis heute nicht viel geändert, wie sich der Anzeige eines auf Pulvertransport spezialisierten Unternehmens entnehmen läßt, das Managern einen Rundgang durch ihre Produktionsanlagen anrät: „If you see the black marks from hammers, you have flow problems“.



Ein goldgelbes Weizenmeer ergoß sich auf die Bahngleise bei Meckenheim

Es gab einen gewaltigen Knall, Blech platzte und aus dem über 20 Meter hohen Silo der Rheinischen Waren-Zentrale (RWZ) ergossen sich rund 800 Tonnen

Weizen nahe dem Bahnhof Meckenheim auf die Gleise der Bahnstrecke Bonn-Euskirchen. Ungeklärt ist, ob Materialermüdung den Silo zum Bersten brachte. Er

sei, genau wie die beiden Silos daneben, regelmäßig vom TÜV kontrolliert worden, erklärten Firmenmitarbeiter. Behinderungen mußten die Fahrgäste der Eisenbahn

in Kauf nehmen, denn die Züge aus Richtung Bonn mußten, wegen der vom Weizen bedeckten Gleise, stundenlang umgelenkt werden. (Bild: Erhard Paul)

Abbildung 1.2: Bild aus dem Kölner Stadt-Anzeiger vom 5.10.1995.

die Lagerung und der Transport von granularen Materialien bis heute bieten und warum Silos eine gegenüber anderen technischen Geräten um den Faktor 100 bis 1000 erhöhte Kollapswahrscheinlichkeit haben [21, 22] – siehe Abb. 1.2.

1.1.3 Fluidisierung und Konvektion

Unter Schwerkraft und ohne äußere Anregung nimmt granulare Materie die „feste“ Form an: Sie liegt als dichte, ruhende Packung vor und hat die vom festen Aggregatzustand molekularer Systeme her bekannte Eigenschaft, scherenden Kräften ohne wesentliche Verformung widerstehen zu können (was verhindert, daß Strandgänger im Sand versinken).

Durch äußere Anregung läßt granulare Materie sich aber auch *fluidisieren*, d.h. in einen Zustand mit eher flüssigkeitsähnlichen Eigenschaften bringen und erhalten. In diesem Zustand reagiert das Medium auf äußere Kräfte durch Fließen, wie von einer Flüssigkeit bekannt, und häufig wird auch Konvektion beobachtet. Die zum Fluidisieren nötige äußere Anregung kann auf verschiedene Art erfolgen: Durch *Schütteln*, z.B. indem man eine Kiste mit Sand vertikalen Vibrationen aussetzt; durch *Scheren*, z.B. wenn man Sand von der schrägen Hand herunterrieseln läßt; oder durch einen *turbulenten Luftstrom*, wie zum

Beispiel im Fall der großtechnologisch sehr bedeutsamen Fließbetten.⁵

Ein nützliches Konzept zur Charakterisierung des „Aggregatzustands“ ist die granulare Temperatur, welche erstmals 1978 von Ogawa [25] in Analogie zur thermodynamischen Temperatur als mittlere quadratische Abweichung der Teilchengeschwindigkeiten von der mittleren Geschwindigkeit definiert wurde:

$$T_g = \langle (\vec{v} - \langle \vec{v} \rangle)^2 \rangle = \langle \vec{v}^2 \rangle - \langle \vec{v} \rangle^2. \quad (1.1)$$

Hierbei bedeutet $\langle \cdot \rangle$ das Mittel über alle Teilchen. Thermodynamische Temperatur der Körner und granulare Temperatur des Systems haben wenig miteinander zu tun, bezieht sich erstere doch auf Moleküle im Korn und letztere auf Körnchen im Gesamtsystem. Die Bedeutung der granularen Temperatur für ein granulares System ist zwar recht ähnlich der der thermodynamischen Temperatur für ein molekulares System (beide erzeugen Druck und bestimmen die inneren Transportraten von Masse, Impuls, Energie), doch gibt es auch bedeutende Unterschiede. Beispielsweise zerfällt granulare Temperatur, die ja nichts anderes mißt als die mittlere kinetische Energie der Teilchen im System, aufgrund der Inelastizität der Korn-Korn-Wechselwirkung von allein, und zwar in Wärme.⁶

Mit steigender Anregung (und steigender granularer Temperatur) lassen sich verschiedene Grade der Fluidisierung unterscheiden. Noch bei relativ niedrigen Anregungen gelangt man zunächst in einen Zustand, in dem plastisches, ruckweises Fließen erstmals möglich wird. Bei immer höheren Anregungen erfolgt das Fließen immer kontinuierlicher, das granulare Medium durchläuft einen intermediären Zustand, bis es sich bei sehr hohen Anregungen im „voll fluidisierten“ Zustand befindet.⁷ Ganz ähnlich wie in geheizten Flüssigkeiten kommt es in fluidisierter granularer Materie zur Ausbildung von Konvektion [28–36]. Diese sorgt für eine ganze Reihe von weiteren, sekundären Effekten, von denen einige im Laufe dieses Kapitels noch kurz angesprochen werden.

1.1.4 Inelastische Mikrostruktur

Makroskopisch folgt aus der Eigenschaft der granularen Temperatur, in Abwesenheit von äußeren Anregungen zu zerfallen, daß fluidisierte granulare Medien nach dem Abschalten der Anregung schnell wieder in den festen Zustand gehen. Fluidisierte granulare Materie fällt damit in die Klasse der getriebenen dissipativen Systeme fern vom Gleichgewicht.

⁵Fließbetten sind granulare Packungen, die durch einen von unten zugeführten Luftstrom im fluidisierten Zustand gehalten werden. Sie zählen damit zu den Zweiphasenströmungen, ein eigenes Gebiet der Verfahrenstechnik. Eines der überraschenden Phänomene, die in Fließbetten gefunden werden, sind Luftblasen [23], die wie in einer Flüssigkeit nach oben steigen und dabei wachsen. Vom technischen Standpunkt aus ist diese Inhomogenität unerwünscht. An die freie Oberfläche gelangende Blasen lösen in großen Anlagen (die mehrere Meter Durchmesser haben können) enorme Vibrationen aus. Zum Thema Fließbetten existieren zahlreiche Übersichtsartikel, z.B. [24].

⁶Die entstehende Wärme erhöht natürlich die thermodynamische Temperatur der Körner. Dies ist aber für die Eigenschaften des granularen Materials unerheblich – heißer Sand fließt nicht anders als kalter Sand.

⁷Offensichtlich ist fluidisierte granulare Materie kein besonders tragfähiger Untergrund. Dies hat allerlei praktische Konsequenzen. Erstes Beispiel: Ignorieren dieser Tatsache hat schon zahlreiche Menschenleben gekostet, etwa im Zusammenhang mit Silowartungen [26]. Zweites Beispiel: Auch Erdreich läßt sich durch genügend starke Vibration fluidisieren, etwa bei einem Erdbeben [27]. Im fluidisierten Untergrund finden Fundamente keinen Halt mehr, was häufig einer der Gründe für Gebäudeschäden durch Erdbeben ist.

Auf mikroskopischer Skala ergibt sich jedoch eine strukturelle Instabilität [37–47]. Sie äußert sich im Ausbilden von Dichteinhomogenitäten, der sogenannten *inelastischen Mikrostruktur*. Ihre Entstehung kann wie folgt veranschaulicht werden. Angenommen, wir haben ein unendlich ausgedehntes granulares Gas mit initial homogener, nichtverschwindender granularer Temperatur. Durch eine Fluktuation in der Dichteverteilung gebe es eine Region geringfügig erhöhter Teilchendichte. Da in dieser Region der mittlere Teilchenabstand erniedrigt ist, kommt es zu einer erhöhten Zahl von Kollisionen pro Zeiteinheit, und deswegen zu einem schnelleren Zerfall der granularen Temperatur als im Rest des Systems. In der Region erniedrigt sich daher der Druck, und neue Teilchen strömen von außen zu. Dies erhöht erneut die Kollisionsfrequenz, führt zu stärkerem Absinken der Temperatur, und so fort. Offensichtlich ist die Tendenz zum Ausbilden der Mikrostruktur umso stärker, je größer die Inelastizität der Korn-Korn-Stöße und je größer die Packungsdichte der Körner ist. Die Dichteinhomogenitäten haben daher eine typische Längenskala von [43, 47, 48]

$$l_d \propto \frac{d}{\eta \sqrt{1 - e_n^2}}, \quad (1.2)$$

wo d der Teilchendurchmesser, η die Packungsdichte und e_n der Restitutionskoeffizient ist (genaue Definitionen dieser Größen folgen später). Um die inelastische Mikrostruktur zu unterdrücken, muß l_d größer als die Systemgröße W werden.

Da sehr dichte Systeme aus geometrischen Gründen nicht stark inhomogen sein können, ergibt sich eine besondere Ausprägung der inelastischen Mikrostruktur bei mittleren Dichten. Die Mikrostruktur kann das Fließverhalten granularer Materie beträchtlich vom Verhalten abweichen lassen, das man im Fall homogener Dichte erwarten würde. Dies wird in Kapitel 5 deutlich werden.

1.1.5 Selbstorganisation

Schüttet man einen Sandhaufen durch konstanten Teilchenzufluß von oben auf, so wird der Winkel zwischen Hügelflanke und der Waagerechten, der sogenannte Böschungswinkel ϑ , nur bis zu einem gewissen Grenzwinkel ϑ_{\max} anwachsen. Jede weitere Zufuhr von Sand führt dann zu Lawinen, die auf der Hügelflanke abgehen. Der Böschungswinkel, den der Sandhaufen nach dem Erliegen der Lawinentätigkeit hat, liegt um einige Grad unter dem maximalen Winkel und wird der Ruhewinkel ϑ_r genannt.

An diesem Experiment läßt sich eine weitere bemerkenswerte Eigenschaft granularer Materie studieren, die sogenannte Selbstorganisation:⁸

- Zunächst liebt das System offenbar von allen Böschungswinkeln speziell jene zwischen ϑ_r und ϑ_{\max} : Bei konstantem „Antrieb“ (Teilchenzufluß) geht es ohne weiteres Zutun, also selbstorganisiert, in genau diesen Zustand hinein. Bak, Tang und Wiesenfeld [49] benutzten 1987 dieses Verhalten als Paradigma für ein neues Konzept, die selbstorganisierte Kritizität, welches eine allgemeine Eigenschaft bestimmter getriebener dissipativer Systeme beschreiben sollte. „Kritisch“ bedeutet hierbei im Falle

⁸Der Begriff Selbstorganisation bezeichnet eine dynamisch aus den mikroskopischen Teilcheneigenschaften resultierende Symmetrieverringung im System. Einfacher ausgedrückt: In einem „selbstorganisierten“ System bildet sich selbsttätig eine nicht von außen aufgeprägte Struktur aus.

des Sandhaufens, daß die Lawinen, die im selbstorganisiert angenommenen Zustand zwischen ϑ_r und ϑ_{\max} beständig abgehen, weder typische Größenskala noch typische Zeitskala besitzen, eine Eigenschaft, die von der Theorie kritischer Systeme her bekannt ist.⁹ Die Kritizität konnte bisher allerdings nur für kleine Sandhaufen bewiesen werden [50], während in den meisten anderen Experimenten abweichendes Verhalten beobachtet wird [51–53].

- Zweitens betrifft die Lawinentätigkeit nur die freie Hügeloberfläche (man findet, daß die „aktive Zone“ nur wenige Teilchendurchmesser tief ist). Wodurch ist die Grenzlinie zwischen fließend und fest hier bestimmt? Offenbar gibt es eine Selbstorganisation der Teilchen, die zu einer *Lokalisation der Scherzone* führt. Dies wird in fließenden granularen Medien sehr häufig beobachtet. Durch die Trennung in fließende und feste Bereiche wird das Verhältnis zwischen Scher- und Normalspannung und daher die Dissipation herabgesetzt [54, 55]. Es gibt Messungen und theoretische Vorhersagen, die eine typische Breite der Scherzonen der Größenordnung 10 Teilchendurchmesser ergeben [56–59].

Bei den Experimenten in Scherzellen, die besonders in den achtziger Jahren im Zeichen des wiedererwachenden Interesses an granularen Medien durchgeführt wurden [54, 60–62], war es eine der großen Schwierigkeiten, über die Breite der Apparatur hinweg eine konstante Scherrate zu erzielen und eine Selbstorganisation in fließende und feste Bereiche zu unterbinden. In Silos findet man häufig Kernfluß, bei dem fließendes Material in der Mitte und ruhendes Material an den Wänden scharf getrennt sind.¹⁰ Neueren Interpretationen zufolge könnte eine Lokalisation der Scherzone auch der Grund für ein lange unverstandenes Phänomen sein: Sogenannte Sturzströme [5, 64–66], riesige Erdrutsche, die weitaus weitere Strecken zurücklegen, als es ihnen nach Maßgabe von zur Verfügung stehender potentieller Energie und innerer Reibung im Fall homogener Scherung erlaubt sein sollte.¹¹ Sturzströme haben auf der Erde schon mehrere Dörfer ausgelöscht und lassen sich auch auf Mars und Mond [67] feststellen. Man vermutet, daß der Erdrutsch auf einer fluidisierten Schicht von Felsstücken gleiten könnte.

1.1.6 Größensegregation

Granulare Medien, die aus verschiedenartigen Komponenten bestehen, zeigen unter jeglicher Bewegung eine starke Tendenz zur Entmischung (Segregation). Auch dieses Phänomen ist ein Beispiel für Selbstorganisation in fließenden granularen Medien. Von allen Unterschieden zwischen den Bestandteilen, die Segregation hervorrufen, ist die Teilchengröße der bedeutsamste [68]: Entgegen der Intuition steigen die größten Körnchen nach oben. Geologen ist dieser Effekt als *inverse Gradierung* in Sedimentschichten wohlbekannt, Ingenieure beschäftigen sich schon seit langem mit dem aufgrund Segregation nicht ganz einfachen Mischen von Pulvern (siehe die Literaturübersicht [69] mit über 600 Zitaten),

⁹Diese Hypothese löste gleichfalls eine Lawine aus, allerdings von Veröffentlichungen. Selbst US-Vizepräsident Al Gore griff die Idee in seinem Buch *Wege zum Gleichgewicht* auf.

¹⁰Um gleichförmige Fließbewegung (Massenfluß) zu erreichen, werden Schilde oder Siebe in Silos eingebaut [12, 63].

¹¹Ein Sturzstrom, der 1903 die Stadt Frank in Kanada dem Erdboden gleichmachte, legte nicht nur 4 km horizontal nach dem Abrutschen von einem 1 km hohen steilen Abhang zurück, sondern floß anschließend sogar noch 130 m an der gegenüberliegenden Seite des Tales bergauf [65].

und auch im Alltag kann man die Größensegregation zum Beispiel an Müslipackungen studieren, wo die größeren Nüsse meist an der freien Oberfläche zu finden sind. Segregation tritt außerdem beim Befüllen von Silos [70] oder in Trommelmischern auf (hier gibt es sowohl radiale [71] als auch axiale [72, 73] Segregation).

Die jüngsten Forschungen zeigen, daß es mindestens zwei Mechanismen der Größensegregation gibt: Einen geometrischen und einen dynamischen. Sie sollen am Beispiel einer besonders häufig betrachteten Versuchsanordnung, der in senkrechter Richtung gerüttelten Kiste, kurz angesprochen werden.

- Geometrisch können kleine Körnchen leichter unter große Körnchen schlüpfen als umgekehrt. Es ergibt sich für die großen Körnchen dadurch ein Ratscheneffekt, der ihnen den Aufstieg leichter macht als den Abstieg [74–77].
- Wie bereits angesprochen, kommt es in geschüttelter granularer Materie zu Konvektion. Es gibt einen schmalen, recht schnellen Abwärtsstrom an den Behälterwänden und einen breiten, langsameren Aufwärtsstrom in der Mitte. Große Teilchen werden in der Mitte mit dem Strom an die Oberfläche befördert, sind aber zu groß, um an der Wand wieder mit dem Strom abzusteigen [78, 79].

In der Praxis ist es schwierig, bei ungeordneten Systemen Konvektion zu unterdrücken [80, 81]; man wird es also häufig mit zwei gleichzeitig wirksamen Mechanismen zu tun haben, die sich möglicherweise aber in ihrer typischen Zeitskala, oder der typischen „Segregationsrate“, unterscheiden.

1.1.7 Weitere Eigenschaften

Neben den bisher genannten Eigenschaften und Beispielen gibt es noch eine Reihe weiterer überraschender Effekte in granularen Medien, die in diesem Abschnitt kurz und ohne eingehende Diskussion angesprochen werden. Die meisten von ihnen waren in jüngster Zeit Gegenstand der Forschung.

- *Haufenbildung*

Regelt man in einer Sandbox, die vertikalen Vibrationen unterworfen ist, Frequenz und Amplitude derart, daß gelegentliche Umstrukturierungen im Material vorkommen, aber noch keine makroskopische Fluidisierung zu beobachten ist, so bilden sich an den Gefäßwänden Hügelaufwerfungen, die alsdann zur Mitte hin wandern, wo sie sich vereinigen und einen einzigen Haufen bilden [82].

- *Dünendröhnen, Silohupen*

Unter bestimmten Umständen können Dünen laute Dröhngeräusche von sich geben, ein seit dem Altertum bekanntes Phänomen [83, 84]. Die Geräusche werden durch an der Leeseite der Düne abgehende Sandlawinen ausgelöst.

Beim Austragen von granularem Material aus Silos kommt es häufig zu lauten Dröhngeräuschen, die als Silobeben oder Silohupen bekannt sind [85]. Dies ist ein bis heute nicht befriedigend gelöstes oder gar erklärtes Problem.

- *U-Rohr-Instabilität*

Wird ein sandgefülltes, an beiden Seiten nach oben offenes U-Rohr vertikalen Vibrationen ausgesetzt, so findet man in bestimmten Bereichen von Frequenz und Amplitude, daß die Höhe der Sandsäule im einen Rohr fällt und im anderen im gleichen Maße ansteigt [33].

- *Druckminimum unter Sandhaufen*

Der Druckverlauf unter auf gewöhnliche Weise aufgeschütteten Sandhaufen weist ein Minimum im Zentrum auf [86]. Als naive Erklärung bietet sich die bereits diskutierte Gewölbebildung an; es scheint aber auch möglich, diesen Effekt auf während des Schüttvorgangs stattfindende Größensegregation zurückzuführen [86].

- *Musterbildung*

Sand auf einer vibrierten Platte zeigt eine erstaunliche Vielfalt von Oberflächenmustern ähnlich den Chladnischen Klangfiguren, die sich in Abhängigkeit von der Anregungsamplitude verändern [87].

Ein von Wind oder Wasser überstrichenen granulares Material (Sandstrand, Düne, Bachbett) verliert seine ursprünglich glatte Oberfläche und bildet Rippel aus [83, 88, 89].

- *Kein Tempolimit beim Pflügen*

Nachdem Traktoren zum Pflügen eingesetzt wurden, stellte man fest, daß die dabei auftretende Reibungskraft kaum von der Zuggeschwindigkeit abhängt [17]. Dies deckt sich mit Ergebnissen von Laboruntersuchungen, bei denen Klingen durch granulare Materie gezogen wurden; auch hier hängt die erforderliche Zugkraft nur geringfügig von der Zuggeschwindigkeit ab [90].

1.2 Makromechanik

Die Entwicklung von Theorien zur Beschreibung granularer Materie begann 1773 mit Coulomb, der einige heute noch gültige Ideen zur Stabilität statischer granularer Packungen, dem Gebiet der Bodenkunde, entwickelt hat. Bis in die sechziger Jahre unseres Jahrhunderts schritt jedoch die Theoriebildung nur langsam und sporadisch voran. Hagen untersuchte 1852 „Druck und Bewegung des trocknen Sandes“ [14], Reynolds formulierte 1885 das schon angesprochene Dilatanzprinzip [9], und Janssen veröffentlichte 1895 seine Analyse des Bodendrucks in Silos [15]. Im zwanzigsten Jahrhundert ging ein bedeutender Impuls erst wieder von dem britischen Militär und Naturforscher Bagnold¹² aus, der 1954 ein Schlüsselexperiment mit granularem Material in einer ringförmigen Scherzelle durchführte und eine erste phänomenologische Theorie granularen Flusses entwickelte, die er zur Erklärung einiger Aspekte granularen Fließverhaltens verwenden konnte [84, 91, 92]. Erst 1961 gab es Bemühungen durch Jenike [93] und später Johanson, den Silobau von der Stufe der reinen Empirie zu einer exakten Wissenschaft zu erheben.¹³ Seit Ende der

¹²Ralph Alger Bagnold (1896–?) führte als Angehöriger der britischen Armee 1929–1938 zahlreiche Expeditionen u.a. in die libysche Wüste durch, wo er Dünen beobachtete, klassifizierte und ihre Entstehung analysierte, wovon seine Bücher *Libyan Sands* und *Physics of Blown Sand and Desert Dunes* berichten.

¹³Pariseau und Nicholson schreiben hierzu [94]: „Despite the exponential increase in the tonnage of bulk materials handled and the growing requirements for precise materials handling control in the mining and processing industries, fundamental progress in binhopper engineering was essentially at standstill until

siebziger Jahre arbeiten besonders in Nordamerika mehrere Forscher wie Savage, Lun, Jenkins, Haff an der Theoriebildung auf dem Gebiet der fließenden granularen Materie. Zur Diskussion dieser Theorien ist es sinnvoll, vorab die Berechtigung von Kontinuumsbeschreibungen anzusprechen sowie eine Klassifizierung der Formen granularen Flusses vorzunehmen.

1.2.1 Berechtigung der Kontinuumsbeschreibung

Aufgrund der großen Zahl von Teilchen, die an einem typischen granularen Fluß teilnehmen, verbietet sich eine detaillierte Beschreibung, die jedes Teilchen einzeln berücksichtigt, von selbst; stattdessen wird man eine grobgerasterte Beschreibung wählen, bei der das Verhalten individueller Teilchen nicht mehr aufgelöst wird und nur noch gemittelte Teilcheneigenschaften in Form der sogenannten Zustandsgrößen eine Rolle spielen. Grundvoraussetzung für eine solche *Kontinuumsbeschreibung* ist, daß typische mikroskopische bzw. mesoskopische Längenskalen, wie Teilchendurchmesser oder Korrelationslänge, klein gegenüber der Systemgröße ist, und daß sich die Zustandsgrößen auf diesen Längenskalen nur vernachlässigbar wenig ändern. Tatsächlich ist jedoch in vielen granularen Systemen schon die Teilchengröße d selbst nicht unbedingt als klein gegen die Systemgröße W anzunehmen; berücksichtigt man die Ausbildung der inelastischen Mikrostruktur mit ihrer typischen Längenskala l_d (Gleichung (1.2)), so muß für die strenge Gültigkeit einer Kontinuumsbeschreibung sogar $d \ll l_d \ll W$ gelten. Die linke Beziehung erfordert nach Gleichung (1.2) einen Restitutionskoeffizienten, der nahe eins ist, also nahezu elastische Teilchen. Neueste Arbeiten von Radjai zu dichtgepackten Systemen zeigen darüber hinaus, daß durch den Rotationsfreiheitsgrad der einzelnen Körnchen zusätzliche mesoskopische Längenskalen definiert werden können [95–97].

Die strenge Gültigkeit von Kontinuumsbeschreibungen bei granularen Medien ist also in vielen praktischen Fällen prinzipiell in Zweifel zu ziehen. Existierende Kontinuumsbeschreibungen führen jedoch durchaus zu richtigen Resultaten und erfahren daher eine Rechtfertigung a posteriori. Mangels einer geeigneten Alternative wird daher bei der Beschreibung des Verhaltens granularer Materie auf makroskopischer Ebene sehr häufig von Kontinuumsbeschreibungen mit ihren Konzepten wie Spannung und Verformung Gebrauch gemacht.

1.2.2 Klassifizierung der Flußformen

In Anlehnung an Savage [98] lassen sich drei Flußregimes in Abhängigkeit von der Scherrate und der Dichte des Systems unterscheiden:

1. *Quasistatisches, plastisches Regime*;
gekennzeichnet durch niedrige Scherrate, hohe Dichte. Teilchen sind in ständigem und langanhaltendem Kontakt mit mehreren Nachbarn, Spannungen werden von aus solchen Kontakten bestehenden Kraft-Netzwerken erzeugt, so daß der Reibung hier eine sehr wichtige Rolle zukommt.

1961 when Andrew Jenike published his pioneering work.“

2. *Volldynamisches, flüssigkeitsähnliches Regime*;
gekennzeichnet durch hohe Scherrate, geringe bis mittlere Dichte. Teilchenkontakte finden hauptsächlich in Form von binären Kollisionen statt, Spannungen werden bei mittleren Dichten durch Kollisionen und bei fallender Dichte zunehmend durch Teilchentransport erzeugt.
3. *Übergangsregime*;
gekennzeichnet durch mittlere Scherrate und Dichte. Enthält typischerweise verschiedene Zonen, die jeweils eher dem volldynamischen und dem quasistatischen Regime zuzuordnen sind. Dies ist eine Konsequenz der bereits angesprochenen strukturellen Instabilität (inelastische Mikrostruktur) sowie der Tendenz zur Selbstorganisation (Lokalisation der Scherzone). In diesem Regime sind sowohl Reibung als auch Kollisionen für die Erzeugung der Spannungen von Bedeutung.

Darüber hinaus gibt es natürlich auch noch den statischen Fall mit verschwindender Scherrate und hoher Dichte. Die Bodenkunde hat eigene theoretische Beschreibungen für die Tragfähigkeitseigenschaften in diesem Regime entwickelt, die im wesentlichen auf die Pionierarbeiten von Coulomb zurückgehen. Da es in der vorliegenden Arbeit nicht um statische Eigenschaften geht, wird nicht weiter darauf eingegangen; eine Einführung und Übersicht findet man bei Chen und Saleeb [27].

1.2.3 Kontinuumstheorien und kinetische Theorien

Wie generell in der Materialtheorie, so gibt es auch zur Beschreibung des Verhaltens granularer Materie zwei Klassen von Gleichungen: Bilanzgleichungen, die materialunabhängig gelten, und die sogenannten Stoffgleichungen (englisch *constitutive equations*), die die Eigenschaften des jeweiligen Materials charakterisieren, indem sie Zusammenhänge zwischen den phänomenologischen Größen wie Spannung, Verformung etc. herstellen.¹⁴ Die Beschaffung geeigneter Stoffgleichungen ist also vorrangiges Ziel der Theoriebildung. Hierfür existieren zwei in ihrer Philosophie grundverschiedene Ansätze.

- Im Rahmen von *Kontinuumstheorien* [99] wird das empirisch in Schlüsselexperimenten beobachtete Stoffverhalten rein phänomenologisch und modellhaft beschrieben. An die Gleichungen werden bestimmte Anforderungen gestellt, die eine Verletzung physikalischer Grundgesetze ausschließen; meist müssen zusätzliche innere Zustandsvariablen postuliert werden. Die so aufgestellten Stoffgleichungen sind häufig komplex, voller phänomenologischer Konstanten und in ihrer physikalischen Bedeutung schwer zu durchschauen. Im Falle granularer Materie wurden solche Theorien hauptsächlich im quasistatischen Regime verwendet [5, 100–106] (für eine ausführliche Diskussion sei auf die Übersichtsartikel [5, 66, 107, 108] verwiesen). Hier gibt es jedoch noch viele offene Fragen und keine der existierenden Stoffgleichungen ist frei von Kritik oder in der Lage, alle bekannten Phänomene richtig zu reproduzieren [5, 66, 109].

¹⁴So beschreibt ein linearer Zusammenhang zwischen Spannung und Verformung den sogenannten Hooke'schen Festkörper und ein linearer Zusammenhang zwischen Spannung und Scherrate (zeitlicher Änderung der Verformung) die sogenannte Newtonsche Flüssigkeit.

- Im Rahmen der *kinetischen Theorien* wird versucht, die (makroskopischen) Stoffgleichungen aus den mikroskopischen Eigenschaften des Materials abzuleiten. Dies ist allerdings nicht für alle Materialien und unter allen Bedingungen möglich; erfolgreiche kinetische Theorien existieren beispielsweise für dünne und dichte Gase oder Gummi. Im Falle granularer Materie beschränken sich diesbezügliche Versuche im allgemeinen auf das volldynamische Regime, wo sie unter gewissen Einschränkungen brauchbare Beschreibungen der Wirklichkeit liefern [25, 42, 48, 55, 91, 110–125] (für eine ausführliche Diskussion siehe auch die Übersichtsartikel [66, 98, 126, 127]). Während das Zurückgehen auf mikroskopische Gesetze vom physikalischen Standpunkt her zunächst befriedigender scheint als ihr völliges Ignorieren durch die Kontinuums-theorien, sind auch sie jedoch nur als (bewußt einfach gehaltene) Modellvorstellungen zu verstehen, die möglicherweise wichtige Details der Mikrophysik vernachlässigen. Gängige Vereinfachungen in kinetischen Theorien sind die Einschränkung auf nahezu elastische und monodisperse, d.h. gleich große Teilchen und das Vernachlässigen des Rotationsfreiheitsgrads.

Um aus Bilanzgleichungen und Stoffgleichungen konkrete Aussagen über das Systemverhalten in speziellen Geometrien zu gewinnen, fehlen noch *Randbedingungen*, die im Falle der granularen Materie besonders schwierig zu beschaffen sind: Anders als in der Hydrodynamik verschwindet die Fließgeschwindigkeit an ortsfesten Wänden im allgemeinen nicht. Es zeigt sich sowohl experimentell [54, 61] als auch in Simulationen [128], daß die Fließeigenschaften granularer Materie ganz beträchtlich von den Randbedingungen abhängen. Daher müssen für spezielle Randgeometrien angenäherte Gleichungen entwickelt werden [55, 66, 117, 129, 130], die zusammen mit den das Medium an sich beschreibenden Gleichungen zu lösen sind. Dies ist bisher nur für wenige, einfache Systeme gelungen; häufig entscheiden die Randbedingungen auch über die Existenz oder Nichtexistenz einer Lösung. Die Frage nach der *Stabilität* der Lösungen führt dann selbst in linearer Näherung zu sehr komplizierten Untersuchungen mit seitenlangen Gleichungen [39–41, 45, 46].

1.2.4 Stoffgleichungen für granulare Materialien

Im quasistatischen Regime sind, wie entsprechende Messungen in Scherzellen zeigen [62, 93, 131–133], die Spannungen von der Scherrate nahezu unabhängig. Dies ist eine Folge der Tatsache, daß in diesem Regime Spannungen hauptsächlich durch Reibung zwischen den Körnern erzeugt werden, und Reibungskräfte weitgehend unabhängig von Relativgeschwindigkeiten sind (siehe Abschnitt 1.3.3).

Im volldynamischen Regime gilt dagegen, wie durch Messungen in Scherzellen immer wieder bestätigt [54, 60, 61, 91, 134], in guter Näherung das heute nach Bagnold benannte Stoffgesetz für Scherströmungen: Die Spannungen τ steigen bei konstant gehaltenem Volumen mit dem Quadrat der Scherrate $\partial v_y / \partial x$ an,

$$\tau_{xy} \propto \tau_{xx} \propto \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2. \quad (1.3)$$

Das Verhältnis von Normal- und Scherspannung τ_{xx} / τ_{xy} ist nahezu konstant und der Arcustangens dieser Zahl wird der dynamische Reibungswinkel genannt (in Analogie zum statischen Reibungswinkel, mit dem das Material gegen die Horizontale geneigt werden

muß, bevor es zu fließen beginnt). Anzumerken ist, daß gemäß $\tau_{xy} \propto \tau_{xx}$ die Scherspannung fast nicht von der Scherrate abhängt, wenn statt des Volumens der granularen Packung die Normalspannung konstant gehalten wird.

Spannungen durch innere Reibung sind eine Folge von Impulstransport. Bagnolds einfache Herleitung seines Gesetzes beruht nun auf der Annahme, daß Impuls im gescherten granularen Material ausschließlich durch streifende Kollisionen der Körner, die in benachbarten Schichten mit der Geschwindigkeit $d\partial v_y/\partial x$ aneinander vorbeischießen, übertragen wird [91]. Dann ist sowohl der Impulsübertrag pro Kollision als auch die Rate der Kollisionen proportional zur Scherrate, und die durch Impulsüberträge vermittelten Spannungen proportional zum Quadrat der Scherrate.

Die Gültigkeit von Bagnolds Gesetz erstreckt sich auf granulare Flüsse im volldynamischen Regime mittlerer Dichte, in denen also Kollisionen zwischen den Körnern das Systemverhalten bestimmen. Neuere Untersuchungen [111] geben als feineres Kriterium für die Gültigkeit an, daß der dimensionslose Parameter R , definiert als Verhältnis der mittleren charakteristischen Schergeschwindigkeit $d\partial v_y/\partial x$ zur Quadratwurzel der granularen Temperatur, groß gegen 1 ist; im Falle $R \ll 1$ dagegen, wie es beispielsweise bei einem Scherfluß in Fließbetten erfüllt wäre, ergibt sich wieder Newtonsches Fließverhalten, also lineares Ansteigen der Spannungen mit der Scherrate.

1.2.5 Diskussion

Während für das quasistatische und das volldynamische Regime adäquate theoretische Beschreibungen und Stoffgesetze zumindest für einige Aspekte vorliegen, ist die große Mehrheit der praktisch vorkommenden granularen Flüsse dem Übergangsregime zuzuordnen [135]. Für dieses Regime gibt es nur erste phänomenologische Ansätze einer theoretischen Beschreibung [119, 135, 136]. Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die theoretische Beschreibung granularer Flüsse ein lebhaftes Forschungsgebiet ist, an dem sich insbesondere seit den siebziger Jahren viele Spezialisten verschiedener Fachrichtungen beteiligen. Wenn auch beachtliche Fortschritte erzielt wurden, ist eine umfassende Theorie granularen Fließverhaltens zur Zeit noch in weiter Ferne.¹⁵ In dieser Situation können Simulationen, gerade in ihrem Charakter als „numerische Experimente“, zur Anregung und Evaluation von neuen theoretischen Ansätzen außerordentlich nützlich sein. Ziel dieser Arbeit war es daher, Simulationen als Werkzeug zur Erforschung granularer Flüsse zu diskutieren und zu verwenden. Eine bewußt einfach gehaltene Theorie, die in Kapitel 4 vorgestellt wird, soll zum Verständnis des hier hauptsächlich behandelten Systems beitragen, ohne durch eine zu detaillierte Betrachtung aller möglichen Mikroprozesse von der grundsätzlichen Physik abzulenken.

¹⁵Stuart Savage schreibt hierzu [5]: „The extreme sensitivity of the material response to very small changes in the fractional volume content at the higher concentrations and the complicated nature of the constitutive equations for three-dimensional flows tends to discourage the hope that one will be able to predict with confidence anything but the simplest flows.“

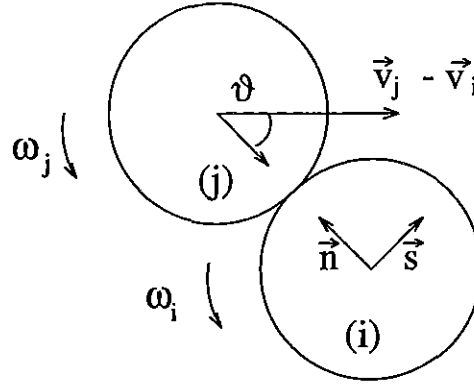


Abbildung 1.3: Geometrie der binären Teilchenkollision.

1.3 Mikromechanik der Teilchenkollision

1.3.1 Beschreibung der Stoßgeometrie

Betrachtet seien zwei Teilchen i und j im Moment ihrer Kollision (Abb. 1.3). Die Radien $R_{i,j}$, Ortsvektoren $\vec{r}_{i,j}$, Geschwindigkeiten $\vec{v}_{i,j}$ und Winkelgeschwindigkeiten $\omega_{i,j}$ seien bekannt (da es sich um einen Stoß in einem zweidimensionalen Versuchsaufbau handelt, wird die Winkelgeschwindigkeit skalar). Ein lokales Koordinatensystem ist durch die zwei Einheitsvektoren \vec{n} und \vec{s}

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} = (n_x, n_y) \quad (1.4)$$

$$\vec{s} = (n_y, -n_x) \quad (1.5)$$

definiert. Die Relativgeschwindigkeit am Kontaktpunkt, \vec{v} , hat den Wert

$$\vec{v} = \vec{v}_j - \vec{v}_i + (R_i \omega_i + R_j \omega_j) \vec{s} \quad (1.6)$$

mit den Komponenten

$$v_n = (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \vec{n} \quad (1.7)$$

$$v_s = (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \vec{s} + R_i \omega_i + R_j \omega_j \quad (1.8)$$

Die „Schiefe“ der Kollision läßt sich beispielsweise über den von \vec{v} und $-\vec{n}$ gebildeten Winkel, den sogenannten Stoßwinkel ϑ , charakterisieren. Für gewisse Zwecke ist es praktischer, $\sin \vartheta = v_s/|v|$ oder $\cos \vartheta = v_n/|v|$ zu messen. Eine besondere Bedeutung hat im folgenden insbesondere der Wert

$$\tan \vartheta = \frac{v_s}{v_n} =: \psi, \quad (1.9)$$

der *Schiefeparameter*, sowie eine Variante, der *symmetrische Schiefeparameter*

$$\tilde{\psi} := -\frac{|v_s|}{v_n}. \quad (1.10)$$

Frontale Kollisionen sind damit durch $\tilde{\psi} = 0$ gekennzeichnet, schiefe Kollisionen durch $\tilde{\psi} > 0$. Diese beiden Fälle werden nun nacheinander diskutiert. Größen, wie sie unmittelbar vor einer Kollision vorliegen, sind im folgenden durch ein hochgestelltes i (wie initial) gekennzeichnet, unmittelbar nach dem Stoß vorliegende Größen dagegen durch ein hochgestelltes f (wie final).

1.3.2 Frontale Kollisionen

1.3.2.1 Elastische Kugeln

Allgemein üben zwei kollidierende Körnchen Kräfte aufeinander aus, die Verformungen und elastische Rückstellkräfte bewirken. Die globale Verformung zweier in Kontakt befindlicher Körner i und j sei durch die Annäherung gegenüber dem unverformten Zustand

$$\xi = \max(0, R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \quad (1.11)$$

beschrieben. Die verformte Region hat eine endliche Ausdehnung, ist aber klein im Vergleich mit dem Teilchendurchmesser. Die lokalen Verformungen und entsprechend die lokalen Rückstellkräfte sind klein am Rand des verformten Gebiets und groß im Zentrum. Aus der klassischen Elastizitätstheorie¹⁶ leitete Heinrich Hertz 1882 folgende Abhängigkeit der globalen Rückstellkraft F_n von ξ für Kugeln ab [139–141]:

$$F_n = -k_n \xi^{3/2}. \quad (1.12)$$

Daß diese Kraft stärker als linear in ξ wächst, folgt aus der Tatsache, daß sich das Kontaktgebiet mit wachsender Annäherung vergrößert. Die „Federkonstante“ k_n ist eine Funktion der Materialkonstanten und der Radien der beteiligten Kugeln:

$$k_n = \frac{4}{3} \sqrt{R_{\text{eff}}} E_{\text{eff}}. \quad (1.13)$$

wobei der effektive Radius $R_{\text{eff}} = R_i R_j / (R_i + R_j)$ ist und E_{eff} eine effektive Elastizitätskonstante, die sich aus Elastizitätsmoduln E und Poissonzahlen ν der Kugeln gemäß $E_{\text{eff}} = E_i E_j / (E_j (1 - \nu_i^2) + E_i (1 - \nu_j^2))$ ergibt. Aus Gleichung (1.12) berechnet man die Kontaktdauer t_n (s. Abschnitt 3.1) zu:

$$t_n = 3.21 \left(\frac{m_{\text{eff}}}{k_n} \right)^{2/5} v_n^{i-1/5}, \quad (1.14)$$

wobei die effektive Masse $m_{\text{eff}} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ ist und v_n^i die initiale Relativgeschwindigkeit. Die Kontaktdauer ist eine wichtige Größe, um abzuschätzen, ob in einem Fluß multiple Korn-Korn-Kontakte zu erwarten sind oder nicht. Typische Kontaktdauern für Kugeln aus verschiedenen Materialien sind in Tabelle 1.1 zu finden.

Neben der elastischen Rückstellkraft gibt es weitere Kräfte, die zwischen zwei in Kontakt befindlichen Körpern wirken können, in dieser Arbeit aber vernachlässigt werden. Als Beispiele seien Kohäsionskräfte durch anhaftende Flüssigkeitsfilme, elektrostatische Kräfte, van-der-Waals-Kräfte oder elastische Kräfte höherer Ordnung (die durch die Oberflächenspannung entstehen [144]) genannt. Darüberhinaus kann es Kräfte geben, die nicht direkt zwischen den Körpern wirken, sondern durch das interstitielle Medium vermittelt werden („hydrodynamische Wechselwirkung“).

Alle diese Kräfte sind für „große“ Teilchen (d.h. solche mit einem Durchmesser der Größenordnung Millimeter oder mehr) in guter Näherung als klein gegen die elastische Kraft anzunehmen.

¹⁶In der Elastizitätstheorie [137, 138] wird angenommen, daß Verformungen endlich bleiben und bei Entlastung wieder völlig verschwinden (reversibles Materialverhalten). In der sogenannten klassischen Elastizitätstheorie wird darüber hinaus ein linearer Zusammenhang zwischen lokalen Spannungen und lokalen Verformungen (Hooke-Gesetz) postuliert.

Material	E (GPa)	ν	Y (MPa)	ρ (g/cm ³)	t_n (μ s)	v_{krit} (cm/s)
Stahl*	212	0.29	564 ^b	7.9	18.0	1.6
Quarzglas†	76	0.17	90	2.5	17.6	0.25
Blei†	17	0.44	140	11.34	54.3	4.95
Duraluminium†	77	0.34	500	2.7	17.3	14.3
Messing 70/30*	100	0.35	450 ^b	8.5	24.6	3.6
Celluloseacetat‡	3.2	0.28	33	1.32	47.3	14.4

Tabelle 1.1: Wichtige Daten einiger typischer Materialien. t_n berechnet nach Gl. (1.14) für Kugeln des Radius $R = 3$ mm und Aufprallgeschwindigkeit $v_n^i = 1$ m/s, v_{krit} berechnet nach Gl. (1.19).

*: Macmillan's Chemical and Physical Data, London 1992

†: Gerthsen, Vogel, Physik, 14. Auflage, Berlin 1982 (Springer)

‡: nach T. G. Drake [142]

b: nach G. Kuwabara, K. Kono [143]

1.3.2.2 Inelastische Kugeln

In der Realität sind Teilchenkollisionen meist nicht elastisch, sondern inelastisch, d.h. dissipativ. Phänomenologisch wird die Inelastizität durch den Restitutionskoeffizienten e_n gemessen, der als Verhältnis der Relativgeschwindigkeiten nach und vor dem Stoß definiert ist:

$$e_n = -v_n^f / v_n^i \quad (1.15)$$

Nach Definition ist $e_n \in [0, 1]$; $e_n = 1$ kennzeichnet ein völlig elastisches Material. Zu beachten ist, daß es alternative Definitionen des Restitutionskoeffizienten gibt, die nur im Fall der frontalen Kollision äquivalent sind [145–147]. Weiterhin sei darauf hingewiesen, daß e_n einen Bezug zwischen Relativgeschwindigkeiten darstellt, nicht zwischen Teilchengeschwindigkeiten, wie sie im Laborsystem gemessen werden. Laut Goldsmith [148] kann man den Restitutionskoeffizienten für die Kollision von Kugeln aus verschiedenen Materialien nach der Näherungsformel $e_{12} \approx (e_{11}E_2 + e_{22}E_1)/(E_1 + E_2)$ bestimmen, wo e_{11} und e_{22} die Restitutionskoeffizienten der jeweiligen Materialien sind.

Die Inelastizität in rein frontalen Kollisionen rührt im wesentlichen von drei Mechanismen her. In der Reihenfolge ihrer Bedeutung sind dies: Plastische Verformung, Viskoelastizität und elastische Wellen im Material [139]. Letztere sind dafür verantwortlich, daß durch einen Aufprall auch hörbare Schallwellen ausgesandt werden, tragen aber im allgemeinen so wenig Energie davon, daß sie als Dissipationskanal zu vernachlässigen sind. Weitaus wichtiger ist die plastische Verformung, d.h. die Erzeugung bleibender Verformungen durch den Aufprall. Um zu untersuchen, wann plastisches Fließen erstmals auftritt, muß eine der in der Plastizitätstheorie gängigen Fließbedingungen angewendet werden. Nach dem von-Mises-Kriterium liegt der Grenzdruck p_0 für plastisches Fließen für Kugeln bei

$$p_0 \approx 1.60 Y, \quad (1.16)$$

wo Y die Fließgrenze der weicheren Kugel ist [139]. Aus der Hertzschen Theorie ergibt sich für den Zusammenhang zwischen dem Maximaldruck entlang der Kontaktfläche p_0

und der äußeren Kraft F_n [139–141]:

$$p_0^3 = 6/\pi^3 \frac{E_{\text{eff}}^2}{R_{\text{eff}}^2} F_n. \quad (1.17)$$

Einsetzen der am Umkehrpunkt der Bewegung herrschenden Normalkraft $F_n(\xi_{\text{max}})$, die sich aus den Gleichungen (1.12), (1.13) und (3.23) ergibt,

$$F_n(\xi_{\text{max}}) = \frac{4}{3} \left(\frac{15}{16}\right)^{3/5} E_{\text{eff}}^{2/5} m_{\text{eff}}^{3/5} R_{\text{eff}}^{1/5} v_n^i{}^{6/5}, \quad (1.18)$$

und Auflösen nach v_n^i liefert die kritische Aufprallgeschwindigkeit v_{krit} , oberhalb der plastisches Fließen beim Aufprall zweier Kugeln auftritt:

$$v_{\text{krit}}^2 \approx 107 \frac{R_{\text{eff}}^3 Y^5}{m_{\text{eff}} E_{\text{eff}}^4}. \quad (1.19)$$

Ist $v_n^i < v_{\text{krit}}$, so bleibt von dem Aufprall keine bleibende Verformung zurück, und alle Dissipation rührt von viskoelastischen Verlusten; andernfalls wird der Verlust durch plastische Verformung deutlich über die viskoelastischen Verluste dominieren. Die meisten Materialien haben eine recht geringe kritische Geschwindigkeit v_{krit} (siehe Tabelle 1.1). Für Aufprallgeschwindigkeiten geringer als v_{krit} wurden experimentell tatsächlich Restitutionskoeffizienten gefunden, die im Rahmen der Meßgenauigkeit bei $e_n = 1$ lagen [149].

Im Falle der plastischen Verformung sagt die Plastizitätstheorie folgende Abhängigkeit des Restitutionskoeffizienten von der Aufprallgeschwindigkeit voraus [139]:

$$e_n \propto v_n^i{}^{-1/4}. \quad (1.20)$$

Im Falle der viskoelastischen Verformung erhält man durch eine Verallgemeinerung der Hertz-Theorie [143, 150, 151] ein Kraftgesetz der Form

$$F_n = -k_n \xi^{3/2} - \gamma_n \xi^{1/2} \dot{\xi}, \quad (1.21)$$

aus dem für kleine $(1 - e_n)$ die folgende Abhängigkeit hergeleitet werden kann (s. Abschnitt 3.1):

$$(1 - e_n) \propto v_n^i{}^{1/5}.$$

In jedem Fall ergibt sich also eine zunehmende Inelastizität bei zunehmender Aufprallgeschwindigkeit, wie intuitiv zu erwarten. Experimentelle Untersuchungen [115, 143, 148, 149, 152–154] für Kugeln aus einer ganzen Reihe verschiedener Materialien weisen alle ein leichtes monotonen Abfallen von e_n mit steigendem v_n^i auf, welches sich mit einem Potenzgesetz in v_n^i vereinbaren läßt, dessen Exponent bei etwa $-1/4$ liegt (siehe Abb. 1.4). Dagegen zeigen Messungen von Drake und Shreve [155] und Foerster *et al.* [156] keine systematische Abhängigkeit des Restitutionskoeffizienten von der Aufprallgeschwindigkeit, die aber in beiden Fällen nur über eine Größenordnung variiert wurde. Festzuhalten bleibt, daß sich dissipative frontale Kollisionen vollständig durch den Normalrestitutionskoeffizienten e_n beschreiben lassen. Obwohl es Hinweise gibt, daß eine Abhängigkeit des letzteren von v_n^i eine Teilerklärung für experimentell beobachtete Abweichungen von Bagnolds Gesetz liefern könnte [115, 157], dürfte sie in den meisten praktischen Fällen granularen Flusses zu vernachlässigen sein.

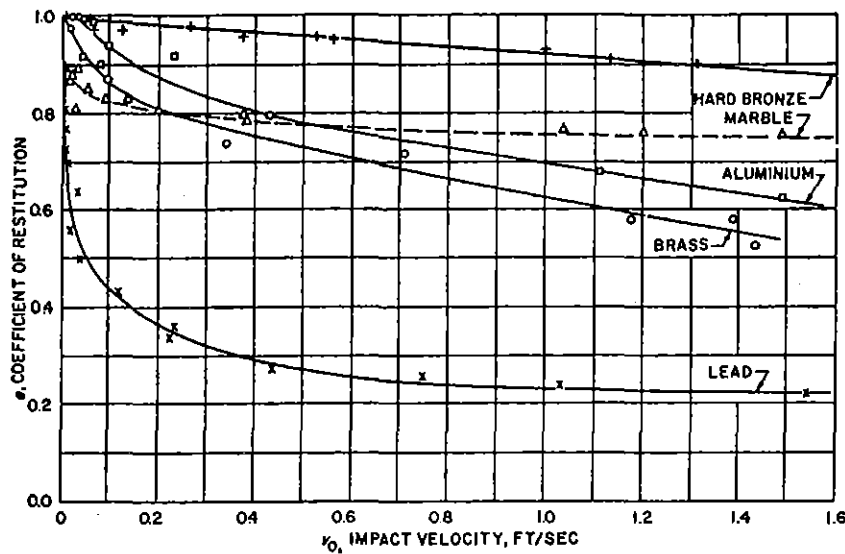


Abbildung 1.4: Abhängigkeit des Restitutionskoeffizienten von der Aufprallgeschwindigkeit; aus [148].

1.3.3 Schiefe Kollisionen

Bei schiefen Kollisionen ($\tilde{\psi}^i > 0$) gibt es zusätzlich zur Normalkraft F_n auch eine durch Reibung vermittelte Tangentialkraft oder Scherkraft F_s , die entlang des Kontaktes derart wirkt, daß sich v_s verringert. Die Reibungsgesetze, die in Ansätzen bereits von Leonardo da Vinci formuliert wurden,¹⁷ verknüpfen die Scherkraft F_s mit der Normalkraft F_n und lauten

$$|F_s| \leq \mu_h |F_n| \quad \text{für Haftreibung } (v_s = 0), \quad (1.22)$$

$$|F_s| = \mu_g |F_n| \quad \text{für Gleitreibung } (v_s \neq 0). \quad (1.23)$$

Hierbei sind μ_h und μ_g die Reibungskoeffizienten für Haft- und Gleitreibung. Im allgemeinen ist $\mu_h > \mu_g$ und beide haben Werte zwischen etwa 0.1 und 0.5. Das „ \leq “-Zeichen in Gl. (1.22) bedeutet, daß im Falle der Haftreibung F_s gerade das negative der (unbekannten) externen Kraft F_s^{ext} beträgt, die entlang des Kontakts wirkt, so daß $v_s = 0$ erhalten bleibt. Wird $F_s^{\text{ext}} > \mu_h F_n$, so wird der Haftreibungskontakt gebrochen und Gleichung (1.23) gilt. Die Ursachen und Eigenschaften der Reibung sind selbst heute, über 200 Jahre nach Coulomb, noch Gegenstand der Forschung¹⁸ [160–164].

Im Kontaktgebiet zweier konvexer kollidierender Körper gilt eine lokale Version der Gleichungen (1.22) und (1.23), welche Normal- und Scherspannungen entlang der Kontaktfläche betrifft. In den äußeren Regionen des Kontaktgebietes, wo die lokalen Verformungen und daher die lokalen Normalspannungen gegen Null gehen, wird es zu lokalem Gleiten (Schlupf genannt) kommen. In der inneren Region dagegen sind unter Umständen die

¹⁷Die Erkenntnisse Leonardo da Vincis (1452–1519) über die Reibung gerieten lange in Vergessenheit und wurden erst von Guillaume Amontons (1663–1705) neugefunden; Charles-Augustin Coulomb (1736–1806) formulierte die Reibungsgesetze dann in ihrer heute noch verwendeten Form.

¹⁸Einen guten Überblick über Geschichte und Stand der Tribologie, der Lehre von den reibenden Kontakten, findet man bei Dowson [158] oder Barquins [159].

lokalen Verformungen so groß, daß $F_s^{\text{ext}} < \mu_s F_n$ erfüllt ist und Haftreibung vorliegt. In diesem Fall zerfällt die Kontaktfläche in eine zentrale haftende Zone und einen äußeren gleitenden Ring. Größe und Form dieser Zonen hängt aufgrund der Nichtlinearität der Reibungsgesetze stark von der Belastungsgeschichte des Kontaktes ab, so daß die Vorhersage der globalen Scherkraft F_s nicht in allgemeiner Form möglich ist.

Verschiedene Autoren [165–172] haben sich der Mühe unterzogen, den Verlauf der globalen Reibungskraft F_s für einige Spezialfälle von Belastungsgeschichten zu analysieren.¹⁹ In allen Fällen wurde die Gültigkeit der Hertzschen Theorie vorausgesetzt, d.h. der Fall elastischer Stöße angenommen. Als interessantestes Resultat darf dabei gelten, daß es bei moderat schiefen Kollisionen zu einer Umkehrung der tangentialen Relativgeschwindigkeit v_s kommen kann, d.h. zu einem negativen Tangentialrestitutionskoeffizienten

$$e_s = v_s^f / v_s^i. \quad (1.24)$$

Dies ist eine Folge der Tatsache, daß elastische Materialien nicht nur in Normalenrichtung, sondern auch in Tangentialrichtung auslenkbar sind und somit auch „tangentiale Bewegungsenergie“ speichern können. Wie bei der Elastizität in Normalrichtung kann man sich die Wirkung der Tangentialelastizität durch einen Oszillator ersetzt denken, der hier in Tangentialrichtung wirkt und eine Schwingungsdauer $2t_s$ besitzt. Wenn es während der Kollision zu Haftreibung kommt (also nur bei kleinen Schiefeparametern $\tilde{\psi}$), kann in diesem Oszillator Bewegungsenergie gespeichert und gegen Ende des Stoßes wieder in tangentiale Bewegung umgewandelt werden, die dann, wie die Bewegung in Normalrichtung auch, umgekehrte Orientierung als zu Beginn des Stoßes hat. Hierzu wird im Abschnitt 3.2, bei der Diskussion von Tangentialkraftmodellen für die zeitschrittgetriebene Molekulardynamiksimulation, noch einiges gesagt werden.

Experimentell ist Umkehr der Tangentialgeschwindigkeit für Kugeln vielfach bestätigt worden [148, 156, 168, 174]. Abbildung 1.5 zeigt die Meßergebnisse von Foerster *et al.* [156] an Kugeln aus Celluloseacetat (offene Kreise). Hierbei wurde zur Charakterisierung des Kollisionsverhaltens als Funktion der Schiefe des Stoßes

$$\psi^i = v_s^i / v_n^i \quad (1.25)$$

gegen

$$\psi^f := v_s^f / v_n^i \quad (1.26)$$

aufgetragen (man beachte, daß im Nenner von ψ^f die *initiale* Normalgeschwindigkeit steht). Diese Auftragung wurde erstmals von Maw, Barber und Fawcett vorgeschlagen [167] und wird daher im folgenden abgekürzt MBF-Diagramm genannt. Das MBF-Diagramm bietet den Vorteil, daß der Tangentialrestitutionskoeffizient (1.24) unmittelbar durch $e_s = \psi^f / \psi^i$ vom Diagramm abgelesen werden kann und daß das Kollisionsverhalten unabhängig vom Betrag der Aufprallgeschwindigkeit dargestellt wird.²⁰ $e_s = 1$ bedeutet dabei perfekt reibungsfreie (glatte) Teilchen, $e_s = 0$ entspricht einer Endtangentialgeschwindigkeit von Null, also Rollen, und $e_s < 0$ deutet auf Tangentialrestitution. Die Existenz der Tangentialrestitution bei kleinen ψ^i ist in Abb. 1.5 deutlich zu sehen.

¹⁹Dieser läßt sich für Kollisionen auch messen [173].

²⁰Hierbei ist implizit angenommen, daß der Normalrestitutionskoeffizient nicht durch Tangentialkomponenten der Relativgeschwindigkeit beeinflusst wird. Dies ist genau genommen nicht erfüllt [145].

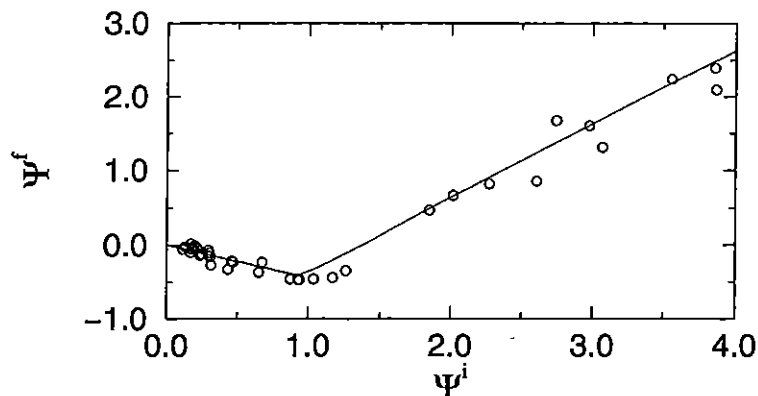


Abbildung 1.5: MBF-Diagramm von Celluloseacetatkugeln.
 Kreise: Experimentelle Daten aus [156] mit freundlicher Genehmigung von M. Louge
 Durchgezogene Linie: Waltonsches Stoßmodell. Simulation mit den Werten $e_n = 0.89$, $\mu = 0.21$, $e_s = -0.39$.

Das Waltonsche Kollisionsmodell

Maw *et al.* [167] führen aus, daß beim schiefen Stoß, abhängig vom Schiefeparameter, grundsätzlich drei verschiedene Situationen auftreten können:

- Während der Gesamtdauer des Kontaktes beim Stoß kommt es nur zu Gleitreibung; dann muß $e_s > 0$ sein. Dies entspricht dem Grenzfall sehr großer ψ^i .
- Während des Stoßes wird v_s durch Gleitreibung auf Null abgebremst, so daß anschließend Haftreibung vorliegt. Das resultierende e_s hängt dann von dem Moment ab, in dem der Übergang zwischen Gleitreibung und Haftreibung erfolgte, denn in diesem Moment kommt möglicherweise noch die Tangentialelastizität zum Tragen. Dies entspricht dem Fall mittlerer ψ^i .
- Gleich von Beginn des Stoßes liegt Haftreibung vor. Dann kommt von Anfang an die Tangentialelastizität zum Tragen; der genaue Wert von e_s hängt dann vom Verhältnis der Schwingungsdauern in Normal- und Tangentialrichtung, t_s/t_n , und ψ^i ab. Dies entspricht dem Grenzfall sehr kleiner ψ^i .

Walton [175] schlug ein vereinfachtes Kollisionsmodell vor, das aus diesem Bild durch Vernachlässigen des zweiten Regimes und Annahme eines konstanten Tangentialrestitutionskoeffizienten im dritten Regime hervorgeht. Dann ist es möglich, schiefe Stöße vollständig durch den Normalrestitutionskoeffizienten e_n , den Tangentialrestitutionskoeffizienten e_s und den Gleitreibungskoeffizienten μ_g zu beschreiben. In Abschnitt 2.1.1 werden auf der Basis dieses vereinfachten Bildes kinematische Gleichungen für den schiefen Stoß zweier Kugeln abgeleitet. Die durchgezogene Linie in Abb. 1.5 illustriert das Kollisionsverhalten, das durch Anpassung der drei freien Parameter an die experimentellen Ergebnisse von Foerster *et al.* [156] aus dem Waltonschen Modell resultiert.

1.3.4 Diskussion

Die Mikromechanik kollidierender Körper ist ein bis heute aktives Forschungsgebiet mit vielen offenen Fragen von einiger Subtilität [139,147]. Scheinbar einfache Konzepte wie der Normalrestitutionskoeffizient oder der Reibungskoeffizient enthalten eine sehr komplexe Physik und sind nicht wirklich eindeutig definiert [145–147,176]. Angesichts dieser Tatsache verwundert es nicht, daß nur in einigen einfachen Spezialfällen wie der Kollision zweier freier Teilchen hinreichend gesicherte Aussagen über die zwischen den Teilchen wirkenden Kontaktkräfte gemacht werden können. Kommen zusätzliche äußere Kräfte hinzu, etwa durch Kollision der beiden in Kontakt befindlichen Teilchen mit einem dritten Körper, gibt es keinerlei quantitative theoretische Vorhersage über die entsprechenden Kontaktkräfte mehr.

Um dennoch zum Zwecke der Simulation Kontaktkräfte zu formulieren, muß man auf stark modellhafte Ansätze zurückgreifen. In Kapitel 3 werden einige solcher Ansätze vorgestellt, eingehend diskutiert und anhand ihrer Eigenschaften im Falle der binären Kollision mit experimentellen Ergebnissen aus der Literatur verglichen.

Kapitel 2

Simulationsmethoden

Fast alle gängigen Methoden der Computersimulation sind bereits auf granulare Systeme angewendet worden. Generell lassen sich diese in drei Klassen aufteilen:

- zeitintegrierende Methoden: Berechnung der Zeitentwicklung durch Integration der Bewegungsgleichung (Molekulardynamik).
- mittelwertbildende Methoden: Abtasten des Phasenraums mit Hilfe von Zufallszahlen (Monte Carlo) [177].
- schematisierende Methoden: Annäherung des realen Systems durch ein *einfaches* mikroskopisches Modell, dessen makroskopische Eigenschaften dann zu errechnen sind (beispielsweise Zellularautomaten [178–181], *random-walk*-Ansätze [182] oder das BTR-Modell [75, 183]).

In dieser Arbeit wurden zwei verschiedene zeitintegrierende Methoden verwendet, die zwei unterschiedlichen Systemklassen angemessen sind. Wie im vorigen Kapitel erwähnt, lassen sich granulare Flüsse abhängig von Scherrate und Dichte in Klassen unterteilen. Vom simulationstechnischen Aspekt entspricht dem eine Unterscheidung nach der vorherrschenden Art der Korn-Korn-Wechselwirkung: kurze, nur paarweise auftretende Kontakte (im volldynamischen Regime) oder langanhaltende, multiple Kontakte (im quasistatischen Regime). Im ersten Fall eignet sich die sogenannte ereignisgesteuerte Molekulardynamik besonders gut zur Integration, während im zweiten Fall und im Übergangsregime die zeitschrittgesteuerte Molekulardynamik zum Einsatz kommt. Da in der Literatur eine kritische Wertung insbesondere der zeitschrittgesteuerten Molekulardynamik und ihrer Kraftansätze bislang fehlte, und die gängige Praxis das oft unreflektierte Anwenden bestimmter *ad-hoc*-Kraftansätze war, nahm die systematische Behandlung der Methode und ihrer praktischen Anwendbarkeit sowie der kritische Vergleich der wichtigsten Kraftansätze einen nicht unwesentlichen Teil der vorliegenden Arbeit ein. Teile dieses und des nächsten Kapitels sind weitgehend identisch mit den Inhalten zweier Vorabveröffentlichungen [184, 185].

Im folgenden werden nun die beiden Simulationsmethoden mit ihren spezifischen Vor- und Nachteilen eingehend diskutiert. Ein spezielles System, auf das die Methoden in den Kapiteln 4 und 5 angewendet werden, sei zu Illustrationszwecken bereits hier vorgestellt.

Es handelt sich um ein zweidimensionales granulares Medium, das unter dem Einfluß der Schwerkraft durch ein zweidimensionales Rohr mit rauhen Wänden fließt. Die Wände werden durch ortsfeste Wandteilchen dargestellt, und durch periodische Randbedingungen in axialer Richtung ist eine sozusagen geschlossene Geometrie hergestellt (Abb. 4.1 auf Seite 61). Die Simulationmethode soll es erlauben, ausgehend von gegebenen Anfangsbedingungen die weitere zeitliche Entwicklung eines solchen Systems zu untersuchen.

2.1 Ereignisgesteuerte (ED-) Molekulardynamik

In Systemen, in denen die Teilchenkontakte als praktisch instantane, zeitlich wohlgeordnet nacheinander abfolgende Paarkollisionen angesehen werden können und zusätzlich die Teilchenbewegung zwischen Kollisionen durch analytisch lösbare Bewegungsgleichungen beschrieben ist, kann man die entsprechende analytische Lösung zum Avancieren der Teilcentrajektorien zwischen den Kollisionen benutzen. Der Zeitpunkt der jeweils nächsten Kollision wird ebenfalls aus der Lösung der Bewegungsgleichung bestimmt (was den größten Teil der Rechenzeit ausmacht), und die Auswirkungen der Kollision für die beiden am Stoß beteiligten Körner wird durch Anwendung eines noch zu definierenden „Kollisionsoperators“ berücksichtigt. Diese Methode wurde erstmals 1957 von Alder und Wainwright für ein System elastischer harter Teilchen benutzt und ist unter dem Namen *Event-Driven Molecular Dynamics*, also Ereignisgesteuerte Molekulardynamik, bekannt geworden. Wir werden sie im folgenden durch das Kürzel ED (für *Event-Driven*) bezeichnen. Für granulare Systeme ist das Verfahren seit den frühen 80er Jahren besonders von Campbell und später Luding angewendet worden [128, 186–193].

In den folgenden zwei Abschnitten werden die zwei wichtigsten Komponenten der Methode, der Kollisionsoperator und die Bestimmung der Kollisionszeit, näher diskutiert.

2.1.1 Der Kollisionsoperator

Betrachtet sei eine Geometrie wie in Abb. 1.3 auf Seite 16 skizziert. Der Kollisionsoperator gibt die neuen Geschwindigkeiten und Winkelgeschwindigkeiten der zwei kollidierenden Teilchen als Funktion der alten Geschwindigkeiten und Winkelgeschwindigkeiten sowie der Stoßgeometrie und der Materialkonstanten an. Eine häufig verwendete Bedingung lautet beispielsweise, daß die tangentielle Relativgeschwindigkeit nach dem Stoß verschwindet, was unendlich rauhen Körnern gleichkommt [187, 188]. Ein physikalischerer Kollisionsoperator ergibt sich auf der Basis des Waltonschen Kollisionsmodells (Abschnitt 1.3.3), das den schiefen Stoß durch die drei Materialkonstanten e_n , μ und e_s beschreibt. Er soll im folgenden kurz hergeleitet werden.

Der Kollisionsoperator ist vollständig bestimmt, wenn der beim Stoß auftretende Impulsübertrag \vec{J} bzw. seine Komponenten $J_n = \vec{J} \cdot \vec{n}$ und $J_s = \vec{J} \cdot \vec{s}$ bekannt sind, denn die Differenzen der Geschwindigkeiten und Winkelgeschwindigkeiten der an der Kollision beteiligten Teilchen i und j vor und nach dem Stoß ($\Delta \vec{v}_i = \vec{v}_i^f - \vec{v}_i^i$ usw.) sind durch \vec{J} gegeben:

$$m_i \Delta \vec{v}_i = -m_j \Delta \vec{v}_j = \vec{J} \quad (2.1)$$

$$(I_i/R_i) \Delta\omega_i = (I_j/R_j) \Delta\omega_j = J_s. \quad (2.2)$$

Hierbei ist R der Radius und I das Trägheitsmoment mit $I = 2/5 mR^2$ für homogene Kugeln. Die Relativgeschwindigkeit am Kontaktpunkt war:

$$\vec{v} = \vec{v}_j - \vec{v}_i + (R_i\omega_i + R_j\omega_j) \cdot \vec{s} \quad (1.6)$$

Unter Verwendung der Gleichungen (2.1) und (2.2) erhält man

$$\Delta\vec{v} = \vec{v}^f - \vec{v}^i = m_{\text{eff}}^{-1} \vec{J} + \frac{5}{2} m_{\text{eff}}^{-1} J_s \vec{s} \quad (2.3)$$

Die Normalkomponente des Impulsübertrags \vec{J} ergibt sich aus Gleichung (2.3) zusammen mit der Definition des Normalrestitutionskoeffizienten $v_n^f = -e_n v_n^i$:

$$J_n = -m_{\text{eff}}(1 + e_n)v_n^i. \quad (2.4)$$

Für große Stoßwinkel erhält man den Betrag von J_s unmittelbar aus Gleichung (2.4) und der Tatsache, daß der Gleitreibungskoeffizienten μ das Verhältnis von Normal- und Tangentialkomponente des Impulsübertrags bestimmt, $|J_s| = \mu|J_n|$. Da die Reibung stets der Bewegungsrichtung entgegengesetzt ist, lautet J_s :

$$J_s^{(\mu)} = \mu m_{\text{eff}}(1 + e_n)v_n^i \frac{v_s^i}{|v_s^i|} \quad (2.5)$$

$$= -\mu m_{\text{eff}}(1 + e_n)v_s^i / \tilde{\psi}^i. \quad (2.6)$$

mit dem symmetrischen Schiefeparameter $\tilde{\psi}^i = -|v_s^i|/v_n^i$.

Für kleine Stoßwinkel ergibt sich J_s aus (2.3) unter Berücksichtigung der Definition des Tangentialrestitutionskoeffizient e_s , $v_s^f = e_s v_s^i$:

$$J_s^{(e_s)} = \frac{2}{7} m_{\text{eff}}(e_s - 1)v_s^i \quad (2.7)$$

Der Übergang zwischen beiden Regimes erfolgt bei fallenden v_s^i in dem Moment, wenn $J_s^{(e_s)} = J_s^{(\mu)}$ wird, also bei einem Grenz-Schiefeparameter $\tilde{\psi}_0^i$ mit dem Wert

$$\tilde{\psi}_0^i = \frac{7}{2} \mu \frac{1 + e_n}{1 - e_s}. \quad (2.8)$$

Damit sind die Impulsüberträge für die beiden möglichen Fälle sowie ein Grenzkriterium zur Unterscheidung zwischen beiden bestimmt. Die Geschwindigkeiten und Winkelgeschwindigkeiten nach dem Stoß lassen sich nun durch Einsetzen des aus Gleichung (2.4) und (2.6) bzw. (2.7) berechneten Impulsübertrags in Gleichung (2.1) und (2.2) errechnen. Das Ergebnis der Anwendung des hier vorgestellten Kollisionsoperators kann in Abb. 1.5 auf Seite 22 mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden. In den in dieser Arbeit vorgestellten ED-Simulationen wird durchgehend der Spezialfall $e_s = 0$ des Operators verwendet.

2.1.2 Die Kollisionszeit

Im Hinblick auf die spätere Anwendung interessieren hier nur zwei Klassen von möglichen Zusammenstößen: Solche zwischen zwei freien Teilchen im Gravitationsfeld und solche zwischen einem freien Teilchen im Gravitationsfeld und einem ortsfesten (Wand-) Teilchen.

Die Orte und Geschwindigkeiten zweier Teilchen i und j zum Zeitpunkt t_0 seien bekannt: $\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{v}_i, \vec{v}_j$. Die Bedingung, daß diese Teilchen sich zum späteren Zeitpunkt $t_0 + t_{ij}$ berühren, lautet:

$$|\vec{r}_j(t + t_{ij}) - \vec{r}_i(t + t_{ij})| = d_{ij}, \quad (2.9)$$

wobei $d_{ij} = R_i + R_j$ ist. Wenn es sich um zwei freie Teilchen im Gravitationsfeld handelt, so wird aus dieser Beziehung

$$|\vec{r}_{ij} + t_{ij}\vec{v}_{ij}| = d_{ij} \quad (2.10)$$

mit $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ und $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$. Die Terme in der Erdbeschleunigung \vec{g} haben sich dabei herausgehoben. Dies führt im weiteren auf eine quadratische Gleichung in t_{ij} ,

$$v_{ij}^2 t_{ij}^2 + 2b_{ij} t_{ij} + (r_{ij}^2 - d_{ij}^2) = 0 \quad (2.11)$$

worin $b_{ij} = \vec{r}_{ij}\vec{v}_{ij}$ ist. Wenn diese Gleichung reelle Lösungen besitzt, geben diese die zwei Kontaktzeiten (erstmaliger Kontakt und letztmaliger Kontakt bei zwischenzeitlicher Überlappung) der beiden Teilchen an. Sind die beiden Lösungen dagegen komplex konjugiert, wird es keine Kollision zwischen den Teilchen geben.

Ist nur ein Teilchen i frei, während es sich bei Teilchen j um ein starres Wandteilchen handelt (das also im Gegensatz zum freien Teilchen keine Erdbeschleunigung erfährt), so hat die Gleichung, die bei Berührung gilt, folgendes Aussehen:

$$|\vec{r}_{ij} + t_{ij}\vec{v}_{ij} - \frac{1}{2}\vec{g}t_{ij}^2| = d_{ij}. \quad (2.12)$$

Dies führt auf eine Gleichung vierter Ordnung in t_{ij} :

$$\frac{1}{4}g^2 t_{ij}^4 - \vec{v}_{ij}\vec{g} t_{ij}^3 + (v_{ij}^2 - \vec{r}_{ij}\vec{g}) t_{ij}^2 + 2b_{ij} t_{ij} + (r_{ij}^2 - d_{ij}^2) = 0 \quad (2.13)$$

Ein Polynom vierter Ordnung besitzt vier im allgemeinen komplexe Nullstellen. Im Prinzip ließe sich mit Hilfe des Sturmschen Satzes die Anzahl der *reellen* Lösungen dieser speziellen Gleichung ermitteln. Dies ist jedoch sehr umständlich und auch gar nicht nötig, denn aus physikalischen Gründen kann die Anzahl der reellen Lösungen entweder 0 oder 2 sein; diese zwei t_{ij} entsprechen, wie bei der quadratischen Gleichung (2.11), den Zeiten des ersten und letzten Kontakts bei zwischenzeitlicher Überlappung. Gibt es keine reellen Lösungen, so treffen sich die beiden Teilchen nicht.

Natürlich interessieren wir uns in allen Fällen für in der Zukunft liegende Kontakte, also *positive* Lösungen t_{ij} . In sehr dichten Systemen mit sehr geringen Kollisionszeiten kann es aber aufgrund der endlichen Präzision der Zahldarstellung dazu kommen, daß Kollisionen, die um ein sehr Geringes in der Zukunft liegen, als um ein sehr Geringes in der Vergangenheit liegend berechnet werden. Ignoriert man solche Kollisionen, kommt es in der Folge zu unerwünschten Teilchenüberlappungen. Daher empfiehlt es sich, bei Existenz mindestens einer positiven Lösung die kleinste reelle Lösung als Kollisionszeit t_{ij} zu wählen, auch wenn diese von der Größenordnung der Maschinengenauigkeit negativ sein kann.

Im Rahmen eines ED-Programms interessiert ganz besonders das Minimum aller Kollisionszeiten, also die Zeit, die bis zur nächsten Kollision im gesamten System vergeht:

$$t_{\text{col}} = \min_{i < j} t_{ij}. \quad (2.14)$$

Um diese Zeit werden zum gegebenen Zeitpunkt t_0 alle Teilchentrajektorien avanciert. Auf das kollidierende Teilchenpaar wird sodann der Kollisionsoperator angewandt, anschließend das neue t_{col} bestimmt, und so fort. Wie groß ist der Aufwand, der für die Bestimmung von t_{col} zu leisten ist? In einem System mit N Teilchen müssen offensichtlich zunächst $\mathcal{O}(N^2)$ einzelne t_{ij} berechnet werden. Gibt es unter den N Teilchen eine Anzahl N_w starrer Wandteilchen, so reduziert sich die Zahl zu evaluierender Einzelzeiten bereits, denn zwischen zwei starren Teilchen gibt es keine Kollisionen. Weiterhin ist es gar nicht nötig, nach jeder Kollision *alle* t_{ij} neu zu berechnen; die meisten neuen Kollisionszeiten ergeben sich aus den entsprechenden alten durch

$$t_{ij}^{\text{neu}} = t_{ij} - t_{\text{col}}. \quad (2.15)$$

Ausnahmen sind alle jene t_{ij} mit $i \in \{k, l\}$ oder $j \in \{k, l\}$, wo k und l die Nummern der gerade kollidierten Teilchen sind – denn deren Trajektorien haben sich durch die Kollision verändert. Nach anfänglicher Berechnung aller t_{ij} sind also im weiteren Verlauf der Rechnung nur die jeweils von einer Kollision betroffenen t_{ij} neu zu berechnen, während sich alle anderen aus (2.15) ergeben. Eine weitere Verminderung des Aufwandes läßt sich durch die Verwendung von Nachbarschaftslisten erreichen [194, 195]. In der vorliegenden Arbeit wurde hierauf allerdings wegen der geringen Größe der simulierten Systeme verzichtet.

2.1.3 Intrinsische Probleme: Zenon-Effekt

Wo die Erfüllung ihrer Voraussetzungen garantiert sind, also beispielsweise im idealen oder auch realen Gas, funktioniert die ereignisgesteuerte Molekularodynamik hervorragend und gestattet eine gegenüber der noch zu beschreibenden zeitschrittgesteuerten Molekularodynamik enorm schnelle Integration der Systementwicklung. Im Fall der granularen Materie ist dies nicht immer der Fall, da dissipative Systeme, wie erwähnt, eine strukturelle Instabilität besitzen: Ungetrieben verlieren sie ihre Relativgeschwindigkeit und bilden Zonen hoher Dichte aus. In dieser Situation kann es zu multiplen und langanhaltenden Kontakten kommen, die in den Konzepten von ED nicht vorgesehen sind. Wie Achill im Paradoxon des Zenon die Schildkröte niemals überholen kann, so konvergiert dann die Methode in immer kürzeren Kollisionszeiten gegen den Zeitpunkt, zu dem sich ein langanhaltender Kontakt schließt [44, 196]. Das bedeutet noch nicht, daß ED für granulare Systeme nicht anwendbar wäre; es muß nur gesichert sein, daß überall im System stets genug Relativbewegung der Teilchen vorhanden ist, um einen Clusterzustand zu vermeiden. Grundsätzlich besteht auch die Möglichkeit, Cluster als eigenständige Einheit zu definieren, die sich nach bestimmten Regeln bilden und wieder auflösen. Ein solcher Algorithmus wurde für eindimensionale Systeme von Luding vorgestellt, der dadurch den Aufprall dichtgepackter Kolumnen von Teilchen auf eine Wand simulieren konnte [197, 198]; eine Verallgemeinerung des Algorithmus auf zwei oder gar drei Dimensionen ist aber leider nichttrivial und noch nicht in der Literatur beschrieben.

Eine weitere Beeinträchtigung erfährt die Methode in dem hier interessierenden System, wo freie Teilchen durch Wandteilchen in einer Geometrie mit periodischen Randbedingungen begrenzt sind. Es kann nämlich geschehen, daß ein gegebenes freies Teilchen nicht mit einem in der Nähe befindlichen Wandteilchen stoßen wird, sondern mit einem seiner periodischen Bilder. Für die Berechnung der Kollisionszeiten bedeutet das, daß auch Stöße mit

periodischen Bildern der Wandteilchen betrachtet werden müssen, was den Aufwand vervielfacht. Wie viele periodische Bilder in die Betrachtung miteinbezogen werden müssen, damit keine Teilchen-Wand-Kollision übersehen wird, hängt stark vom betrachteten System ab. Allgemein erhöht sich diese Zahl mit sinkender Packungsdichte und steigender mittlerer axialer Geschwindigkeit. In den in Kapitel 4 vorgestellten ED-Simulationen mußten teilweise bis zu fünf periodische Bilder in Flußrichtung berücksichtigt werden.

2.2 Zeitschrittgesteuerte (TD-) Molekulardynamik

Sind Voraussetzungen der ED-Methode nicht erfüllt, d.h. gibt es keine analytische Lösung der Bewegungsgleichung zwischen den Stößen (beispielsweise bei Anwesenheit von langreichweitigen Kräften) oder lassen sich multiple/langanhaltende Kontakte nicht ausschließen, kann man die Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i = \vec{F}_i / m_i \quad (i = 1, N) \quad (2.16)$$

numerisch aufintegrieren. Dies geschieht normalerweise mit Standardverfahren, die mit konstantem Zeitschritt arbeiten, weshalb diese Methode als *zeitschrittgesteuerte Molekulardynamik* bezeichnet wird (abgekürzt TD für englisch *Timestep-Driven*). Sie ist seit 1964 für molekulare Systeme [199] und seit den späten 70er Jahren für granulare Systeme [34, 35, 81, 157, 200–215] angewendet worden. Die zwei Hauptkomponenten der Methode, das Integrationsverfahren und die Definition der wirkenden Kräfte \vec{F}_i , werden in den folgenden zwei Abschnitten diskutiert, bevor ihre intrinsischen Probleme zur Sprache kommen. Diese wurden lange Zeit verkannt; insbesondere in Deutschland, wo TD-Simulationen granularer Materie erst seit den frühen 90er Jahren durchgeführt werden, waren die ersten Jahre der Anwendung durch eine gewisse Euphorie gekennzeichnet. Erst die jüngste Vergangenheit hat ein Erkennen der Grenzen dieser vielseitigen und nützlichen Methode gebracht.

2.2.1 Prädiktor-Korrektor-Verfahren

Von den vielen etablierten Verfahren der numerischen Integration [194, 216] kann hier nur eines vorgestellt werden, das auch den in späteren Kapiteln vorgestellten TD-Rechnungen zugrunde lag: Das sogenannte Prädiktor-Korrektor-Verfahren.

Wenn zu einem Zeitpunkt t_0 die Teilchenpositionen \vec{r}_i und ihre ersten k Zeitableitungen bekannt sind,¹ lassen sich die gleichen Größen zum Zeitpunkt $t_0 + \Delta t$ durch eine Taylorentwicklung bis zum k -ten Glied approximieren. Dies ist der sogenannte Prädiktor ($k + 1$)ter Ordnung. Am Beispiel eines Prädiktors 4. Ordnung:

$$\left. \begin{aligned} \vec{r}^p(t_0 + \Delta t) &= \vec{r}(t_0) + \Delta t \vec{v}(t_0) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t_0) + \frac{1}{6} \Delta t^3 \vec{b}(t_0) + \dots \\ \vec{v}^p(t_0 + \Delta t) &= \vec{v}(t_0) + \Delta t \vec{a}(t_0) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{b}(t_0) + \dots \\ \vec{a}^p(t_0 + \Delta t) &= \vec{a}(t_0) + \Delta t \vec{b}(t_0) + \dots \\ \vec{b}^p(t_0 + \Delta t) &= \vec{b}(t_0) + \dots \end{aligned} \right\} \quad (2.17)$$

¹Entsprechendes gilt natürlich für den Rotationsfreiheitsgrad. Massen und Kräfte sind dann durch Trägheitsmomente und Drehmomente zu ersetzen.

Hierbei bezeichnet der Index p die vom Prädiktor vorhergesagten Werte, und $\vec{r}, \vec{v}, \vec{a}, \vec{b}$ sind die Position, die Geschwindigkeit, die Beschleunigung und der Ruck eines Teilchens; der Index i wurde fortgelassen. Nun fehlt es den vorhergesagten Größen noch völlig an Bezug zur Bewegungsgleichung; dieser Mangel wird im Korrektorschritt behoben. Unter der Voraussetzung, daß die Kraft \vec{F} eindeutig als Funktion des Systemzustands gegeben ist,

$$\vec{F} = f(\vec{r}, \vec{v}, \vec{a}, \vec{b}), \quad (2.18)$$

läßt sich die vorausgesagte Kraft $\vec{F}^p(t_0 + \Delta t)$ aus dem vorhergesagten Systemzustand berechnen (hier kommt die Bewegungsgleichung zum Zug). Aus ihr ergibt sich eine Korrektorschleunigung

$$\vec{a}^c(t_0 + \Delta t) = \vec{F}^p(t_0 + \Delta t)/m.$$

welche mit der vorhergesagten Beschleunigung $\vec{a}^p(t_0 + \Delta t)$ verglichen werden kann. Die Differenz ist ein Maß für den Fehler des Prädiktorschrittes:

$$\Delta \vec{a}(t_0 + \Delta t) = \vec{a}^c(t_0 + \Delta t) - \vec{a}^p(t_0 + \Delta t). \quad (2.19)$$

Die Größe $\Delta \vec{a}(t_0 + \Delta t)$ wird nun zum Korrigieren des vorhergesagten Systemzustands benutzt:

$$\left. \begin{aligned} \vec{r}^c(t_0 + \Delta t) &= \vec{r}^p(t_0 + \Delta t) + c_0 \Delta \vec{a}(t_0 + \Delta t) \\ \vec{v}^c(t_0 + \Delta t) &= \vec{v}^p(t_0 + \Delta t) + c_1 \Delta \vec{a}(t_0 + \Delta t) \\ \vec{a}^c(t_0 + \Delta t) &= \vec{a}^p(t_0 + \Delta t) + c_2 \Delta \vec{a}(t_0 + \Delta t) \\ \vec{b}^c(t_0 + \Delta t) &= \vec{b}^p(t_0 + \Delta t) + c_3 \Delta \vec{a}(t_0 + \Delta t). \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

Bei geschickter Wahl der Korrektorkoeffizienten c_i liegen die korrigierten Werte näher am wahren Systemzustand als die ursprünglich vorhergesagten. Man kann nun das Verfahren iterieren, d.h. weitere Korrektorschritte auf die korrigierten Werte anwenden, so daß der wahre Systemzustand immer besser approximiert wird. Durch Optimieren der Korrektorkoeffizienten c_i läßt sich erreichen, daß schon der erste Korrektorschritt eine hinreichend gute Approximation liefert. Die Form der c_i wird von der genauen funktionalen Abhängigkeit (2.18) bestimmt. Für eine Abhängigkeit der Form $\vec{F} = f(\vec{r}, \vec{v})$, wie sie bei den in dieser Arbeit gewählten Kraftansätzen vorliegt, ergibt sich beim Korrektor 5. Ordnung, der in dieser Arbeit verwendet wurde [194]

$$(c_0, c_1, c_2, c_3, c_4) = \left(\frac{19}{90}, \frac{3}{4}, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{12}\right). \quad (2.21)$$

für mit dem Zeitschritt Δt skalierte Zeitableitungen des Ortes.

Je kleiner der konstante Zeitschritt Δt , desto genauer ist das Verfahren. Um numerische Stabilität zu gewährleisten, muß Δt klein gegen die kleinste typische Zeit sein, die sich aus der Bewegungsgleichung ergibt. Auf der anderen Seite steigt der Aufwand zur Simulation eines Intervalls physikalischer Zeit umgekehrt proportional zum Zeitschritt an. Man wählt Δt also so groß wie möglich, aber so klein wie nötig.

Um Kontakte in der Bewegungsgleichung zu berücksichtigen, müssen Kontaktkräfte zwischen den Körnern explizit angegeben werden. Im nächsten Abschnitt werden solche Kraftansätze diskutiert, mit Experimenten verglichen und bewertet.

2.2.2 Kontaktkräfte

Zu berechnen ist die Kraft \vec{F}_i , die auf Teilchen i wirkt. Allgemein wird diese Kraft sich additiv aus mehreren Beiträgen zusammensetzen: Gravitationskraft, Kontaktkraft, Kohäsionskraft, van-der-Waals-Kraft, elektrostatische Kraft, usw. In diesem Abschnitt geht es allein um die Kontaktkraft, die sich wiederum additiv aus Einzelkontaktkräften zusammensetzt:

$$\vec{F}_i^{\text{kontakt}} = \sum_j \vec{F}_{ij}^{\text{kontakt}}, \quad (2.22)$$

wobei die Summe über alle mit Korn i in Kontakt befindlichen Nachbarkörner läuft. Ein Kontakt existiert, wenn die Annäherung (1.11)

$$\xi = \max(0, R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i|)$$

von Null verschieden ist. Mit Hilfe des bereits in Abschnitt 1.3.1 definierten lokalen Koordinatensystems \vec{n} und \vec{s} ergibt sich die Kraft $\vec{F}_{ij}^{\text{kontakt}}$ aus einem Normal- und einem Tangentialanteil:

$$\vec{F}_{ij}^{\text{kontakt}} = F_n \vec{n} + F_s \vec{s}. \quad (2.23)$$

Diese Anteile werden nun nacheinander diskutiert.

2.2.2.1 Normalkraft

Zur Modellierung inelastischer frontaler Stöße benötigt man eine dissipative Rückstellkraft. Das Kraftgesetz sollte so formuliert sein, daß sich zwei wichtige Parameter, die bei Experimenten mit kollidierenden Kugeln gemessen werden können, aus dem Kraftgesetz bestimmen und unabhängig voneinander einstellen lassen:² Der Normalrestitutionskoeffizient e_n und die Kontaktzeit t_n . Ersterer spielt aus naheliegenden Gründen eine entscheidende Rolle als Materialkonstante. Der Kontaktzeit kommt dagegen besondere Bedeutung für das Integrationsverfahren zu, da sie die typische Zeitskala für Kollisionen bestimmt und daher zur Festlegung des Integrationszeitschritts Δt benutzt werden kann. Simulationen von Kollisionen mit $\Delta t = t_n/100$ reproduzieren den analytischen Restitutionskoeffizienten e_n mit einem relativen Fehler von etwa 10^{-4} ; für Zeitschritte größer als Δt größer als etwa $t_n/20$ wird das Integrationsschema instabil.

Eine Möglichkeit, eine solche Kraft zu formulieren, ist die additive Kombination einer elastischen Rückstellkraft mit einem viskosen Dämpfungsterm [217]:

$$m_{\text{eff}} \ddot{\xi} = F_n = -k_n \xi^\alpha - \gamma_n \xi^\beta \dot{\xi} \quad (2.24)$$

wobei ξ die lineare Überschneidung (1.11) ist, k_n eine Federkonstante, γ_n eine Dämpfungskonstante, und α und β Exponenten, deren Wahl die speziellen Eigenschaften des Kraftgesetzes beeinflusst. Die linke Gleichung in (2.24) ergibt sich aus der Reduktion des Zweikörperproblems auf ein Einkörperproblem [218]. Bei fest gewählten Exponenten α und β ist das Kraftgesetz durch die zwei Parameter k_n und γ_n bestimmt, die durch Anpassung an das zu simulierende Material bestimmt werden können. Der Exponent α ist unter anderem von der Geometrie der kollidierenden Körper abhängig (so gilt physikalisch

²Das Kraftgesetz braucht also ebenfalls zwei freie Parameter.

streng $\alpha = 1$ für den Kontakt zweier Ebenen, $\alpha = 3/2$ für den Kontakt zweier Kugeln, $\alpha = 2$ für den Kontakt zweier Ecken). Eine detaillierte Diskussion von (2.24) sowie mehrerer Spezialfälle und einer Alternative dazu findet sich im nächsten Kapitel. In dieser Arbeit wurde für Produktionsläufe ausschließlich die Normalkraft (3.14)

$$F_n = -k_n \xi - \gamma_n \dot{\xi}$$

verwendet, die sich aus Gleichung (2.24) durch Wahl von $\alpha = 1$ und $\beta = 0$ ergibt.

Die Kontaktzeit läßt sich im Grenzfall $\gamma_n = 0$, also für elastische Stöße, für allgemeine α berechnen (s. Gleichung (3.5) in Abschnitt 3.1) und es ergibt sich

$$t_n \propto k_n^{-1/(\alpha+1)}.$$

Das bedeutet, daß Simulationen umso aufwendiger werden, je höher k_n , also je „härter“ die Teilchen sind (nach Gleichung (1.13) ist k_n proportional zum Elastizitätsmodul E).

Ein gangbarer Weg zur Anpassung der freien Parameter k_n und γ_n an ein spezifisches Material ist prinzipiell der folgende: Zusätzlich zum bekannten Restitutionskoeffizienten e_n wird mit den Gleichungen (1.13) und (1.14) aus den Materialkonstanten und der typischen Aufprallgeschwindigkeit eine typische Kontaktzeit t_n ausgerechnet. Das Parameterpaar (k_n, γ_n) wird dann so angepaßt, daß es das richtige (e_n, t_n) reproduziert. In der Praxis werden jedoch durchgängig die Teilchen viel weicher gemacht, als es typischen Materialien entspricht, um eine große Kontaktzeit und eine effizientere Simulation zu erreichen. Meist wird argumentiert, daß die makroskopischen physikalischen Eigenschaften der betrachteten Systeme nur von e_n , nicht aber von t_n abhängen sollten. Daß dies nicht unbedingt erfüllt ist, wird sogleich (in Abschnitt 2.2.3) behandelt werden.

2.2.2.2 Tangentialkraft

Eine Tangentialkraft, die einen reibenden Kontakt modellieren soll, muß im Prinzip zwei Anforderungen erfüllen, die durchaus widersprüchlich sind: Jene für Gleitreibung und jene für Haftreibung (vgl. die Diskussion in Abschnitt 1.3.3). Eine solche Kraft zu modellieren, ist offensichtlich nichttrivial. Die verschiedenen Ansätze, die es gibt, werden in Abschnitt 3.2 in detaillierter Form vorgestellt und miteinander verglichen. Ihnen allen ist gemein, daß sie mindestens einen freien Parameter haben, meist den Reibungskoeffizienten μ , und in irgendeiner Form von der Normalkraft F_n abhängen. Exemplarisch sei hier nur ein einfaches Tangentialreibungsgesetz vorgestellt, das in dieser Arbeit durchweg für TD-Produktionsläufe verwendet wurde (s. Gleichung (3.30)):

$$F_s = -\mu |F_n| \cdot \text{sign}(v_s).$$

Wie in Abschnitt 3.2 gezeigt wird, führt dieses Gesetz in Kombination mit der Normalkraft (3.14) zu einem Kollisionsverhalten, das dem Waltonschen Kollisionsmodell mit einem Tangentialrestitutionskoeffizienten von $e_s = 0$ entspricht.

2.2.3 Intrinsische Probleme: *Detachment*, Bremsversagen

Die Probleme entstehen bei beiden im folgenden geschilderten Effekten durch die Endlichkeit der Kontaktzeit t_n , die die Länge des Integrationszeitschritts Δt bestimmt und

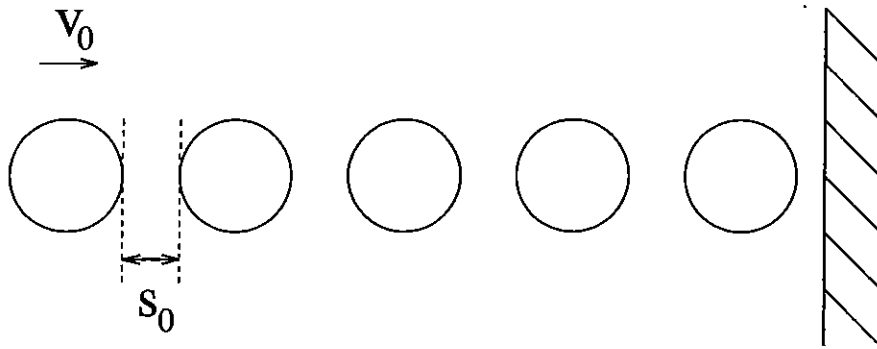


Abbildung 2.1: Konfiguration kurz vor dem kollektiven Stoß.

deshalb aus Gründen der Recheneffizienz so groß wie möglich, jedenfalls größer als physikalisch realistisch, gewählt wird.

2.2.3.1 Verringerte Dissipation durch multiple Kontakte

Dieser Effekt tritt bei kollektiven Kollisionen, also insbesondere in dichten Systemen auf und wurde von Luding *et al.* beschrieben [192, 213]. Man betrachte eine eindimensionale Anordnung von N einzelnen Körnchen, die alle um ein Stück s_0 voneinander getrennt sind und sich mit der gemeinsamen Geschwindigkeit v_0 in Richtung ihrer gemeinsamen Achse auf eine Wand zubewegen (Abb. 2.1). Diese Säule trifft nun auf die Wand auf; es ergibt sich eine Kaskade von Kollisionen, bis zum Schluß alle Teilchen sich sowohl von der Wand als auch vom gemeinsamen Schwerpunkt wegbewegen, und der kollektive Stoß als beendet gelten kann. Der effektive Restitutionskoeffizient der gesamten Teilchensäule sei definiert durch das Verhältnis $e_{\text{eff}} = \sqrt{E^f/E^i}$, wo E^i und E^f die Summen der kinetischen Energien vor und nach dem Stoß sind. Der Wert von e_{eff} hängt drastisch vom Verhältnis t_0/t_n ab, wo $t_0 = s_0/v_0$ die Zeit ist, die ein Teilchen benötigt, um zu einem plötzlich gestoppten Teilchen vor ihm aufzuholen. Dies ergibt sich durch Betrachtung zweier Grenzfälle:

- Falls $t_0/t_n \gg 1$, so spielt sich vom Aufprall des ersten Teilchens der Säule bis zum Ende des kollektiven Stoßes eine sehr große Anzahl von *binären Kollisionen* ab. Bei jeder binären Kollision geht ein Anteil $(1 - e_n)$ der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner verloren. Iteriert man diesen Verlust über die große Zahl der einzelnen Kollisionen, ist leicht zu sehen, daß (insbesondere bei großen N) e_{eff} nahe bei Null liegen muß.
- Falls $t_0/t_n \ll 1/N$, dauert der Kontakt des ersten Teilchens der Säule mit der Wand genau so lang wie die Zeit, die die Verdichtungswelle, die beim plötzlichen Stoppen des ersten Teilchens an der Wand ausgelöst wird, zum Durchqueren der Säule benötigt. Das bedeutet, daß es keine Serie von binären Kollisionen mehr gibt; stattdessen kommt es zu einem *gleichzeitigen Kontakt aller Teilchen*. In dieser Situation wechselwirken die Teilchen als eine Kette von gekoppelten Oszillatoren und nicht als N verschiedene Teilchen; allgemein ist die Zahl der Einzelkollisionen wesentlich gegenüber dem Fall $t_0/t_n \gg 1$ verringert, und der effektive Restitutionskoeffizient e_{eff}

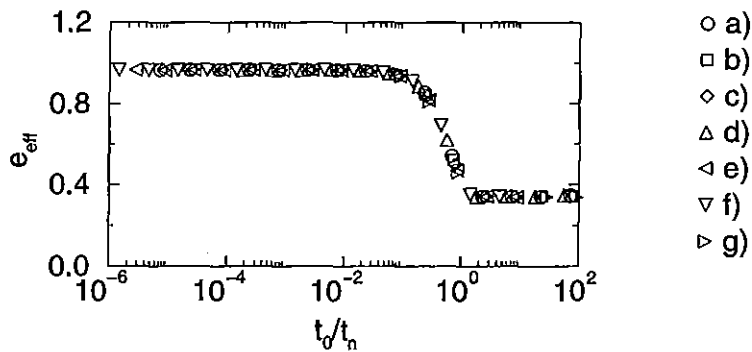


Abbildung 2.2: Änderung des effektiven Restitutionskoeffizienten mit t_0/t_n . Daten von Stefan Luding.

- a) $t_n = 7 \times 10^{-5} \text{ s}$, $v_0 = 0.2 \text{ m/s}$
- b) $t_n = 8.6 \times 10^{-6} \text{ s}$, $v_0 = 0.5 \text{ m/s}$
- c) $t_n = 2.5 \times 10^{-5} \text{ s}$, $v_0 = 0.5 \text{ m/s}$
- d) $t_n = 7 \times 10^{-5} \text{ s}$, $v_0 = 0.008 \text{ m/s}$
- e) $t_n = 1.8 \times 10^{-4} \text{ s}$, $v_0 = 0.2 \text{ m/s}$
- f) $t_n = 2.22 \times 10^{-3} \text{ s}$, $v_0 = 0.03 \text{ m/s}$
- g) $t_n = 2.5 \times 10^{-7} \text{ s}$, $v_0 = 14 \text{ m/s}$.

liegt nahe bei Eins. Da die Teilchen somit nach dem Stoß große Abstände gewinnen, wurde dieses Verhalten von Luding *detachment*-Effekt genannt.

In Abb. 2.2 sind Werte von e_{eff} dargestellt, wie sie sich aus TD-Simulationen einer Säule mit $N = 10$, $e_n = 0.9$ und verschiedenen t_n , s_0 und v_0 ergeben (Daten aus Ludings Dissertationsschrift [198], mit freundlicher Genehmigung des Urhebers). Zwischen den beiden Grenzregimes liegt ein kontinuierlicher, aber relativ plötzlicher Übergang. Unabhängige ED-Simulationen des gleichen Systems zeigen ein konstantes e_{eff} , nämlich den Wert, der sich bei TD-Simulationen nur für $t_0/t_n \gg 1$ ergibt, über den ganzen Bereich von t_0/t_n . Der *detachment*-Effekt lautet also kurzgefaßt: Bei der TD-Simulation dichtgepackter Systeme führt eine unrealistisch hoch gewählte Kontaktzeit t_n zu einer unrealistisch niedrigen effektiven Dissipation.

Obwohl sich reale Systeme finden lassen sollten, die ebenfalls den *detachment*-Effekt aufweisen, ist darüber in der Literatur bisher nicht berichtet worden. Eines der Artefakte, die aufgrund des *detachment*-Effektes in simulierten Systemen auftreten können, ist eine Fluidisierung bei unrealistisch niedrigen Anregungen [206, 213].

2.2.3.2 Bremsversagen

Bremsversagen tritt nur in Zusammenhang mit nahezu streifenden Kollisionen, also insbesondere bei scherenden Geometrien auf und wurde bereits in zwei Vorabveröffentlichungen dieser Arbeit beschrieben [184, 185]. Betrachtet seien zwei Kugeln, die sich unter einem

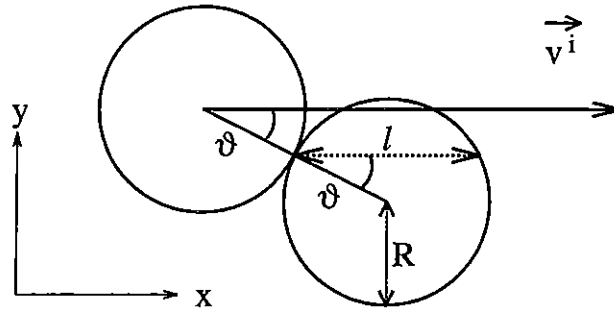


Abbildung 2.3: Skizze zum Bremsversagen.

Stoßwinkel ϑ mit einer Relativgeschwindigkeit $v^i = |\vec{v}^i|$ treffen (Abb. 2.3).

Ein kartesisches Koordinatensystem sei so definiert, daß die x -Achse in Richtung von \vec{v}^i zeigt. Eine Sehne der Länge

$$l = 2R \cos \vartheta \quad (2.25)$$

verbindet den Punkt des ersten Kontakts mit dem hypothetischen Punkt des letzten Kontakts, der in Abwesenheit von Kontaktwechselwirkung aufträte; der entsprechende Abstand zwischen den Teilchenmittelpunkten ist $2l$. Wir interessieren uns für die Dauer des Kontaktes, t_{cont} , und den Verlust an Geschwindigkeit in x -Richtung, der durch den Kontakt entsteht,

$$\Delta v_x \propto \int_{t_{\text{cont}}} F_x(t) dt, \quad (2.26)$$

auch *Bremsfunktion* genannt. Bei frontalen Kollisionen ($\sin \vartheta = 0$) ist t_{cont} natürlich gleich der Kontaktzeit t_n .³ Bei schiefen Kollisionen ist dies nicht mehr notwendigerweise so, und das Kollisionsverhalten hängt in drastischer Weise vom Verhältnis t_b/t_n ab, wo

$$t_b = 2l/v^i \quad (2.27)$$

die Zeit ist, die die Teilchen bräuchten, um einander in Abwesenheit jeder Kontaktwechselwirkung zu durchqueren. Um dies zu verstehen, seien wieder zwei Grenzfälle betrachtet.

- Falls $t_b/t_n \gg 1$, vollzieht sich die Oszillation in Normalenrichtung so schnell, daß die Dauer des Kontaktes nach wie vor durch $t_{\text{cont}} = t_n$ gegeben ist. In dieser Zeit bleibt der Stoßwinkel ϑ praktisch unverändert, so daß $F_x \propto F_n$. Das Integral in Gleichung (2.26) wird dann proportional zu v_n^i , also proportional auch zu v^i , und wir erhalten $\Delta v_x \propto v^i$: Die Bremsfunktion steigt proportional zur Initialgeschwindigkeit, wie zu erwarten.
- Falls $t_b/t_n \ll 1$, so durchqueren sich die beiden Teilchen nahezu ungehindert, und die Dauer des Kontaktes ist $t_{\text{cont}} = t_b$. Über den Verlauf von $F_x(t)$ in Gleichung (2.26) läßt sich nun keine quantitative Aussage mehr machen; jedoch läßt sich das Integral annähern durch $\int_{t_{\text{cont}}} F_x(t) dt \approx \bar{F}_x t_{\text{cont}}$, wo \bar{F}_x eine mittlere Kraft in x -Richtung ist, die nicht wesentlich von t_{cont} abhängt. Wegen $t_{\text{cont}} = t_b = l/v^i$ ergibt sich dann:

³Dies ist wenigstens der Fall, wenn das Verhältnis von Aufprallgeschwindigkeit v_n^i und Federkonstante k_n derart ist, daß nach Gleichung (3.3) die maximale lineare Überschneidung ξ_{max} niemals größer als R wird. Das aber sollte bei allen vernünftigen TD-Simulationen vorausgesetzt werden dürfen.

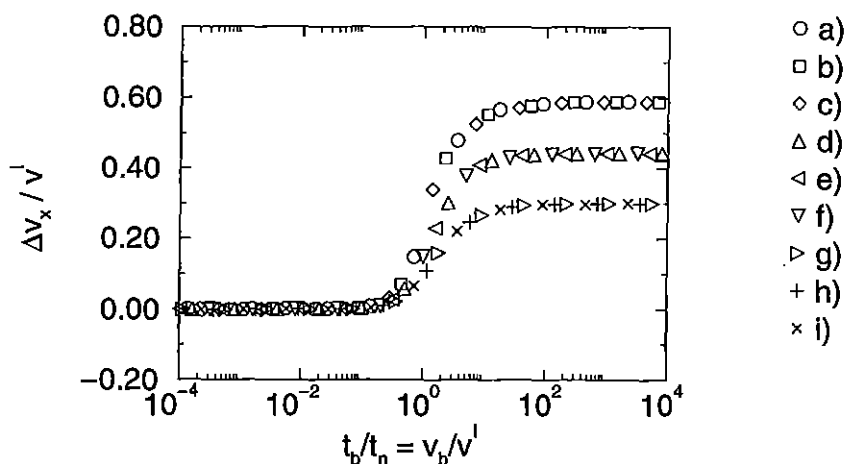


Abbildung 2.4: Änderung der normierten Bremsfunktion mit der Aufprallgeschwindigkeit t_b/t_n .

a), b), c): $\vartheta = 64.2^\circ$, versch. t_n

d), e), f): $\vartheta = 71.8^\circ$, versch. t_n

g), h), i): $\vartheta = 77.2^\circ$, versch. t_n

$\Delta v_x \propto 1/v^i$. Hier nimmt die Bremsfunktion mit steigender Initialgeschwindigkeit ab, ein Verhalten, das durch den Namen *Bremsversagen* charakterisiert wird.

Der Übergang zwischen beiden Regimes findet bei $t_b/t_n \approx 1$ statt, so daß die kritische Geschwindigkeit für Bremsversagen v_b den folgenden Wert hat:

$$v_b \approx 2l/t_n = \frac{4R \cos \vartheta}{t_n}, \quad (2.28)$$

also umso kleiner wird, je schiefer der Stoß ist und je höher die Kontaktzeit t_n gewählt wurde. Kurzgefaßt bedeutet Bremsversagen also: *TD-Simulationen zeigen bei streifenden Kollisionen mit Einfallsgeschwindigkeiten größer als etwa v_b unrealistisch niedrige Dissipation.*

Zur Illustration sind in Abb. 2.4 Werte der normierten Bremsfunktion $\Delta v_x/v^i$ dargestellt, wie sie sich für Kollisionen mit $e_n = 0.9$, $\mu = 0.5$ und verschiedenen ϑ , v^i und t_n ergeben. Für große t_b/t_n ist $\Delta v_x \propto v^i$, so daß sich in Abb. 2.4 konstantes $\Delta v_x/v^i$ ergibt (der exakte Wert hängt dabei von e_n , μ und ϑ ab); bei $t_b/t_n \approx 1$ setzt Bremsversagen ein, und für $t_b/t_n \ll 1$ ist die Bremsung praktisch Null.

Anders als Ludings *detachment*-Effekt ist Bremsversagen ein pures Artefakt der TD-Methode bzw. der verwendeten Kräfte (insbesondere der Tangentialkraft, die tangentialen Verformungen außer acht läßt und durch ein Coulomb-Kriterium $|F_s| \leq \mu|F_n|$ nach oben beschränkt ist). Eines der Artefakte, die durch Bremsversagen entstehen, ist die in Abschnitt 5.1.1 geschilderte Bistabilität in simulierten granularen Rohrflüssen.

2.3 Hybridmethoden

Neben den bisher besprochenen beiden „reinen“ Formen der Molekulardynamik, ED und TD, gibt es auch Ansätze, beide zu verknüpfen. Beispielsweise simulieren McNeil und Madden [219] ein System harter Teilchen mit weichen langreichweitigen Wechselwirkungen, indem das weiche Potential über die harte Potentialstufe hinaus nach innen fortgesetzt wird. Das System wird durch einen TD-Algorithmus integriert; nach jedem Integrations-schritt wird kontrolliert, ob eine (verbotene) Überlappung von Teilchen aufgetreten ist. Ist dies der Fall, wird die Zeit zurückgedreht bis zum geschätzten Kollisionszeitpunkt; nun werden neue Teilchengeschwindigkeiten durch einen Kollisionsoperator bestimmt und die Zeit läuft weiter. Treten während eines Zeitschritts mehrere Überlappungen auf, werden sie durch ein iteratives Schema aufgelöst. Die Annahme ist bei dieser Methode, daß die Systemdynamik hauptsächlich durch die langreichweitigen Wechselwirkungen bestimmt wird und die kurzreichweitige Ausschluß-Wechselwirkung nur eine vergleichsweise kleine Störung macht.

Hopkins und Louge [37, 220] verwenden einen McNeil-Madden-artigen Algorithmus auch zur Simulation von granularen Materialien ohne langreichweitige Wechselwirkung. Zwischen Kollisionen wird dann die analytische Lösung der Bewegungsgleichung angewendet, aber die Teilchenbahnen werden in Zeitschritten Δt avanciert. Nach jedem Zeitschritt wird auf Überlappungen geprüft, und wo sie vorliegen, wird ein Kollisionsoperator *ohne* vorheriges Zurückdrehen der Zeit angewendet. Dafür wird der Zeitschritt Δt während der Rechnung dynamisch so angepaßt, daß die durchschnittliche Überlappung bei Detektierung eines Kontakts einen vordefinierten Bruchteil des Teilchendurchmessers nicht überschreitet. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, daß das aufwendige explizite Vorhersagen des nächsten Kollisionszeitpunktes entfällt. Bei sehr verdünnten Systemen bleibt das pure ED die günstigere Methode; bei mitteldichten Systemen kann man davon ausgehen, daß der Hopkins-Louge-Algorithmus die Rechenzeit minimiert. Bei dichten Systemen mit ihren multiplen und langanhaltenden Kontakten ist das reine TD zu bevorzugen.

Kapitel 3

Methodische Aspekte der TD-Simulation

Dieses Kapitel stellt eine Vertiefung der Inhalte von Abschnitt 2.2 dar. Es enthält eine umfassende Diskussion verschiedener gängiger Kraftgesetze zur TD-Simulation granularer Materie, den ersten Vergleich ihrer Kollisionseigenschaften mit experimentellen Resultaten sowie eine Untersuchung zur Wechselwirkung freier Teilchen mit einer rauhen Wand. Aufgrund seiner eher technischen Natur ist die Lektüre dieses Kapitels aber nicht unbedingt zum Verständnis der gesamten Arbeit notwendig.

Um die hier diskutierten Aspekte des Simulationsverhaltens mit realistischem Verhalten vergleichen zu können, werden die freien Parameter so eingestellt, daß in guter Näherung die Eigenschaften von Celluloseacetatkugeln des Radius 3 mm und der Masse $m = 1.48 \times 10^{-4}$ kg, wie sie in Experimenten von Drake [6, 142, 155] und Foerster *et al.* [156] verwendet wurden, simuliert werden. Einige Materialeigenschaften dieser Kugeln sind in Tabelle 1.1 auf Seite 18 aufgeführt; Foerster *et al.* [156] gaben den Restitutionskoeffizienten im Geschwindigkeitsbereich $0.29 \text{ m/s} \leq v_n^i \leq 1.2 \text{ m/s}$ zu $e_n \approx 0.87$, den Reibungskoeffizienten zu $\mu \approx 0.21$ und den Tangentialrestitutionskoeffizienten zu $e_s \approx -0.39$ an.

3.1 Normalkräfte

3.1.1 Allgemeine dissipative Rückstellkraft

Die allgemeine dissipative Rückstellkraft lautet

$$F_n = -k_n \xi^\alpha - \gamma_n \xi^\beta \dot{\xi} = m_{\text{eff}} \ddot{\xi}. \quad (2.24)$$

Wir gehen zunächst vom Grenzfall verschwindender Dissipation aus, so daß statt (2.24) geschrieben werden kann:

$$\ddot{\xi} = -\frac{k_n}{m_{\text{eff}}} \xi^\alpha. \quad (3.1)$$

Integration nach der Zeit und anschließende Integration nach ξ in den Grenzen von 0 bis ξ führt unter Verwendung der Substitutionsregel und von $\dot{\xi} = v_n^i$ auf

$$\dot{\xi}^2 - v_n^{i2} = -\frac{k_n}{m_{\text{eff}}} \frac{2}{\alpha+1} \xi^{\alpha+1}, \quad (3.2)$$

die Gleichung der Energieerhaltung. Am Umkehrpunkt der Bewegung gilt $\dot{\xi} = 0$, $\xi = \xi_{\text{max}}$. Einsetzen dieser Beziehungen in Gleichung (3.2) liefert die maximale Annäherung

$$\xi_{\text{max}} = \left(\frac{\alpha+1}{2} \frac{m_{\text{eff}}}{k_n} v_n^{i2} \right)^{\frac{1}{\alpha+1}}. \quad (3.3)$$

Umformen der Energieerhaltungsgleichung (3.2) zu

$$\frac{dt}{d\xi} = \left(v_n^{i2} - \frac{k_n}{m_{\text{eff}}} \frac{2}{\alpha+1} \xi^{\alpha+1} \right)^{-1/2} \quad (3.4)$$

und anschließende Integration nach ξ in den Grenzen von 0 bis ξ_{max} liefert die halbe Kontaktzeit t_n . Das Integral auf der rechten Seite läßt sich durch die Substitution $\xi = \xi_{\text{max}} z$ in eine geschlossen lösbare Form überführen, so daß sich für die Kontaktzeit ergibt:

$$t_n = 2 \frac{\xi_{\text{max}}}{v_n^i} I(\alpha) \quad (3.5)$$

mit dem bestimmten Integral

$$I(\alpha) = \int_0^1 (1 - z^{\alpha+1})^{-1/2} dz \quad (3.6)$$

$$= \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{1}{\alpha+1})}{(\alpha+1) \Gamma(\frac{\alpha+3}{2\alpha+2})}. \quad (3.7)$$

Im Grenzfall geringer Dissipation kann eine Abschätzung für die dissipierte Energie E_{diss} durch den Ansatz [198]

$$E^f - E^i = E_{\text{diss}} \approx \bar{F}_{\text{diss}} \xi_{\text{max}} \quad (3.8)$$

gegeben werden, wobei \bar{F}_{diss} die mittlere dissipative Kraft ist, wie sie sich aus dem viskosen Term in Gleichung (2.24) ergibt:

$$\bar{F}_{\text{diss}} \propto \gamma_n \xi_{\text{max}}^\beta v_n^i. \quad (3.9)$$

Einsetzen von (3.9) und (3.3) in Gleichung (3.8) liefert

$$E_{\text{diss}} \propto \gamma_n \left(\frac{m_{\text{eff}}}{k_n} \right)^{\frac{\beta+1}{\alpha+1}} v_n^i \frac{\alpha+2\beta+2}{\alpha+1}. \quad (3.10)$$

Entwickeln von

$$e_n = \sqrt{\frac{E^f}{E^i}} = \sqrt{1 - \frac{E_{\text{diss}}}{E^i}} \quad (3.11)$$

für kleine E_{diss}/E^i bis zum ersten Glied ergibt

$$e_n \approx 1 - \frac{E_{\text{diss}}}{2E^i}, \quad (3.12)$$

so daß unter Berücksichtigung von $E^i = 1/2 m_{\text{eff}} v_n^{i2}$

$$(1 - e_n) \propto \gamma_n k_n^{-\frac{\beta+1}{\alpha+1}} m_{\text{eff}}^{\frac{\beta-\alpha}{\alpha+1}} v_n^i \frac{2\beta-\alpha+1}{\alpha+1}. \quad (3.13)$$

Einige Spezialfälle von (2.24) sind nun zu diskutieren.

3.1.2 Harmonische Rückstellkraft mit Dämpfung

Im Falle $\alpha = 1, \beta = 0$ wird aus Gleichung (2.24) die Gleichung des gedämpften harmonischen Oszillators

$$F_n = -k_n \xi - \gamma_n \dot{\xi} = m_{\text{eff}} \ddot{\xi}, \quad (3.14)$$

in kanonischer Form

$$\ddot{\xi} + 2\delta \dot{\xi} + \omega_0^2 \xi = 0 \quad (3.15)$$

mit den Abkürzungen $2\delta = \gamma_n/m_{\text{eff}}$ und $\omega_0^2 = k_n/m_{\text{eff}}$. Diese Gleichung hat den Vorteil, daß sich die analytische Lösung angeben läßt. Für die Anfangsbedingungen $\xi(0) = 0$ und $\dot{\xi}(0) = v_n^i$ ergibt sich im Schwingfall ($\delta^2 < \omega_0^2$):

$$\xi(t) = \frac{v_n^i}{\omega} \sin(\omega t) \exp(-\delta t), \quad (3.16)$$

wobei $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \delta^2}$ die Schwingungsfrequenz ist. Über die Voraussage von Gleichung (3.5) hinaus kann man für die harmonische Kraft die Kontaktzeit auch im nichtelastischen Fall ($\gamma_n > 0$) geschlossen angeben:

$$t_n = \pi/\omega. \quad (3.17)$$

Die Kontaktzeit hängt also nicht von der Aufprallgeschwindigkeit v_n^i ab. Dies ist in technischer Hinsicht ein Vorteil, da dann der Integrationszeitschritt $\Delta t \approx t_n/100$ unabhängig von den im System auftretenden Aufprallgeschwindigkeiten v_n^i gewählt werden kann. Aus der Lösung (3.16) ergibt sich weiter die maximale Annäherung ξ_{max} und der Restitutionskoeffizient e_n :

$$\xi_{\text{max}} = v_n^i \exp\left(-\frac{\delta}{\omega} \arctan \frac{\omega}{\delta}\right) (\delta^2 + \omega^2)^{-1/2}, \quad (3.18)$$

$$e_n = \exp\left(-\frac{\pi\delta}{\omega}\right). \quad (3.19)$$

Die freien Parameter k_n und γ_n können durch Anpassung von Restitutionskoeffizient e_n und Kontaktzeit t_n an die entsprechenden experimentell bestimmten Werte des zu simulierenden Materials bestimmt werden:

$$k_n = \frac{\pi^2 + (\ln e_n)^2}{t_n^2} m_{\text{eff}} \quad (3.20)$$

$$\gamma_n = -2 \frac{\ln e_n}{t_n} m_{\text{eff}}. \quad (3.21)$$

Im Falle der Drakeschen Celluloseacetatkugeln mit einer angenommenen Kontaktzeit von $t_n = 1 \times 10^{-5}$ s und einem Restitutionskoeffizienten von $e_n \approx 0.87$ ergibt sich $k_n = 7.32 \times 10^6$ N/m sowie $\gamma_n = 2.06$ kg/s. Wegen ihrer zahlreichen praktischen Vorteile ist die harmonische Kraft in vielen Studien verwendet worden [35, 202, 203, 206–208]. Es ist aber zu betonen, daß sie nur eine ad-hoc-Beschreibung dissipativer Kontakte liefert und einige nicht unerhebliche Nachteile hat (s. Abschnitt 3.1.6).

3.1.3 Hertzsche Rückstellkraft

Wenn dichte Systeme simuliert werden, bei denen viele langanhaltende Kontakte auftreten, werden die Details der Normalkraft wichtig. In diesem Fall kann man $\alpha = 3/2$ setzen,

wodurch (2.24) die Form der physikalisch realistischen Hertz-Kraft (1.12) aus Abschnitt 1.3.2 erhält:

$$F_n = -k_n \xi^{3/2} \quad (1.12)$$

Die Kontaktzeit hat dann laut (3.5) den Wert

$$t_n = 3.21 \left(\frac{m_{\text{eff}}}{k_n} \right)^{2/5} v_n^i{}^{-1/5}, \quad (3.22)$$

der bereits in Abschnitt 1.3.2 erwähnt wurde. Bei dieser Wahl von α ist die Kontaktzeit also nicht mehr unabhängig von der Aufprallgeschwindigkeit, so daß der Integrationszeitschritt Δt an die höchste im System zu erwartende Aufprallgeschwindigkeit angepaßt werden sollte. Die maximale Annäherung beträgt laut (3.3) und (1.13)

$$\xi_{\text{max}} = \left(\frac{15}{16} \frac{m_{\text{eff}} v_n^i{}^2}{\sqrt{R_{\text{eff}} E_{\text{eff}}}} \right)^{2/5}. \quad (3.23)$$

Die Federkonstante k_n für das zu simulierende Material kann im Prinzip aus den entsprechenden Materialkonstanten gemäß Gleichung (1.13) bestimmt werden:

$$k_n = \frac{4}{3} \sqrt{R_{\text{eff}} E_{\text{eff}}}.$$

Für Drakes Celluloseacetatkugeln ergibt sich daraus ein Wert von $k_n = 9.0 \times 10^7 \text{ Nm}^{-3/2}$, und die Kontaktzeit nimmt bei einer Aufprallgeschwindigkeit von 1 m/s den Wert $4.73 \times 10^{-5} \text{ s}$ an.

3.1.4 Hertzsche Rückstellkraft mit Dämpfung

Dissipative Kontakte erfordern $\gamma_n > 0$, so daß auch eine Wahl für den Exponenten β im viskosen Term getroffen werden muß.

- In einigen Studien ist der Hertzsche Exponent $\alpha = 3/2$ in Kombination mit $\beta = 0$ verwendet worden [209, 211, 221], so daß

$$F_n = -k_n \xi^{3/2} - \gamma_n \dot{\xi}. \quad (3.24)$$

Dies empfiehlt sich nicht, da gemäß Gleichung (3.13) in diesem Fall

$$(1 - e_n) \propto v_n^i{}^{-1/5}$$

wird, die Inelastizität also mit wachsender Aufprallgeschwindigkeit *abnimmt* statt zunimmt, was insbesondere im Fall verschwindender Aufprallgeschwindigkeit v_n^i zum abnormen Resultat $e_n = 0$ führt.

- Wird stattdessen $\beta = 1/2$ verwendet, erhält man die physikalisch realistische Hertz-Kuwabara-Kono-Kraft

$$F_n = -k_n \xi^{3/2} - \gamma_n \xi^{1/2} \dot{\xi}. \quad (1.21)$$

Für die Inelastizität ergibt sich dann

$$(1 - e_n) \propto v_n^i{}^{1/5} \quad (3.25)$$

in guter Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen (Abschnitt 1.3.2).

- Resultate in vernünftiger Übereinstimmung mit Experimenten erhält man auch bei Verwendung von $\beta = 1$ [222], wodurch sich eine Variation der Inelastizität mit der Einfallsgeschwindigkeit von

$$(1 - e_n) \propto v_n^i{}^{3/5}$$

ergibt.

3.1.5 Plastische Rückstellkraft

Ein anderer Ansatz für eine dissipative Rückstellkraft folgt dem Bild der plastischen Verformung zweier kollidierender Teilchen und wurde von Walton und Braun [157] vorgeschlagen. Sie nehmen an, daß für Belastung und Entlastung des Kontaktes verschiedene Federkonstanten gelten:

$$F_n = \begin{cases} k_1 \xi & , \quad \xi \geq 0 \quad (\text{belasten}) \\ k_2 (\xi - \xi_0) & , \quad \xi < 0 \quad (\text{entlasten}). \end{cases} \quad (3.26)$$

Hierbei ist ξ_0 derjenige Wert von ξ , bei dem unter den gegebenen Umständen die Entlastungskurve die Abszisse schneidet; ist bei der Entlastung $\xi = \xi_0$ erreicht, endet der Kontakt. Die Teilchen sind also nach dem Kontakt „kleiner“ als vorher, wie es dem Bild der plastischen Verformung entspricht.¹ In diesem Modell hat der Restitutionskoeffizient den Wert

$$e_n = \sqrt{k_1/k_2}. \quad (3.27)$$

Definiert man k_2 als Funktion der am Umkehrpunkt der Bewegung herrschenden Kraft F_n^{\max} , etwa durch $k_2 = k_1 + s F_n^{\max}$ (wo s ein zusätzlicher freier Parameter ist), so wird e_n eine monoton fallende Funktion der Aufprallgeschwindigkeit v_n^i :

$$e_n = \left(s v_n^i \sqrt{\frac{m_{\text{eff}}}{k_1}} + 1 \right)^{-1/2}, \quad (3.28)$$

in recht guter Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen.

3.1.6 Vergleich der Kraftgesetze und Diskussion

In Abb. 3.1 sind die v_n^i -Abhängigkeiten des Restitutionskoeffizienten aller besprochenen Kraftgesetze im Vergleich dargestellt. Die Feder- und Dämpfungskonstanten sind dabei so gewählt, daß sich bei $v_n^i \approx 0.7$ m/s gerade ein Restitutionskoeffizient von $e_n = 0.87$ ergibt, wie er von Foerster *et al.* für Drakes Celluloseacetatkugeln im Geschwindigkeitsbereich $0.29 \text{ m/s} \leq v_n^i \leq 1.2 \text{ m/s}$ gemessen wurde. Das unphysikalische Verhalten der Hertzschen Rückstellkraft mit $\beta = 0$ ist hier sehr deutlich zu sehen. Die Hertz-Kuwabara-Kono-Kraft (1.21) und die plastische Rückstellkraft (3.26) zeigen ein realitätsnahes Verhalten (vgl. mit Abb. 1.4 auf Seite 20), während die harmonische Rückstellkraft (3.14) eine gute Beschreibung nur in einem relativ engen Bereich von möglichen Relativgeschwindigkeiten geben kann.

¹ Allerdings gilt diese Verkleinerung nur für jeweils einen Stoß. Beim nächsten Kontakt haben beide beteiligten Teilchen wieder ihren ursprünglichen Durchmesser.

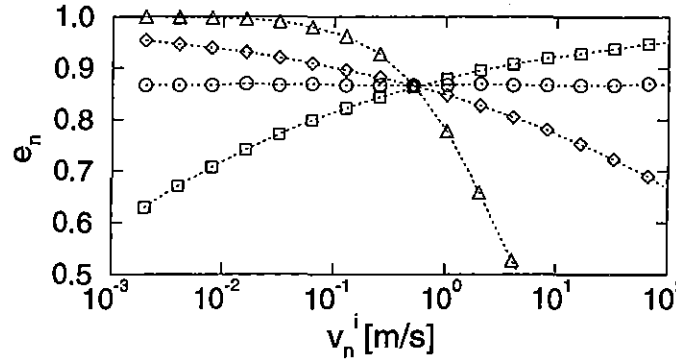


Abbildung 3.1: Variation des Normalrestitutionskoeffizienten mit der Aufprallgeschwindigkeit für die verschiedenen Rückstellkräfte.
 (◦) Harmonische Rückstellkraft (3.14) mit $k_n = 7.32 \times 10^6 \text{ N/m}$ und $\gamma_n = 2.06 \text{ kg/s}$
 (◻) Hertzsche Rückstellkraft (3.24) mit $k_n = 9.0 \times 10^7 \text{ Nm}^{-3/2}$ und $\gamma_n = 0.35 \text{ kg/s}$
 (◊) Hertz-Kuwabara-Kono-Kraft (1.21) mit $k_n = 9.0 \times 10^7 \text{ Nm}^{-3/2}$ und $\gamma_n = 190 \text{ kg m}^{-1/2} \text{ s}^{-1}$
 (△) Plastische Rückstellkraft (3.26) mit $k_1 = 7.32 \times 10^6 \text{ N/m}$ und $s = 2 \times 10^5 \text{ m}^{-1}$.

Verwendung der effektiven Masse m_{eff} in den Kräften

Bisher wurde der Einfachheit halber stillschweigend davon ausgegangen, daß weder der elastische noch der viskose Term von Gleichung (2.24) von m_{eff} abhängt. In diesem Fall ist laut Gleichung (3.13)

$$(1 - e_n) \propto m_{\text{eff}}^{\frac{\beta - \alpha}{\alpha + 1}},$$

so daß e_n für alle besprochenen Exponenten α und β eine monoton steigende Funktion von m_{eff} ist. In vielen Studien [184, 203, 207, 209, 211, 223, 224] wird dagegen ein Vorfaktor m_{eff} für den viskosen Term verwendet. In diesem Fall ergibt sich auch ein zusätzlicher Faktor m_{eff} in Gleichung (3.13), so daß

$$(1 - e_n) \propto m_{\text{eff}}^{\frac{\beta + 1}{\alpha + 1}},$$

und e_n eine monoton fallende Funktion von m_{eff} wird. Schreibt man m_{eff} als Vorfaktor sowohl in den viskosen als auch den elastischen Term [35, 206, 210], so kürzt sich die Masse ganz aus der Schwingungsgleichung heraus und e_n hängt nicht von m_{eff} ab. Das gleiche gilt für Waltons Kraftmodell (3.26).

Leider gibt es keine systematischen experimentellen Untersuchungen zur Massenabhängigkeit von e_n außer einer Arbeit von 1864, die von Goldsmith [148] zitiert wird und für Kugeln gleichbleibender Größe einen leichten Abfall von e_n mit steigendem m_{eff} findet. Tatsächlich gibt es jedoch in den meisten simulierten Flüssen granularer Medien nur geringe Massenunterschiede zwischen einzelnen Körnern. In dieser Situation läuft die Verwendung oder Nichtverwendung von m_{eff} in den Kraftansätzen im wesentlichen auf eine Umskalierung der Feder- und Dämpfungskonstanten k_n und γ_n hinaus.

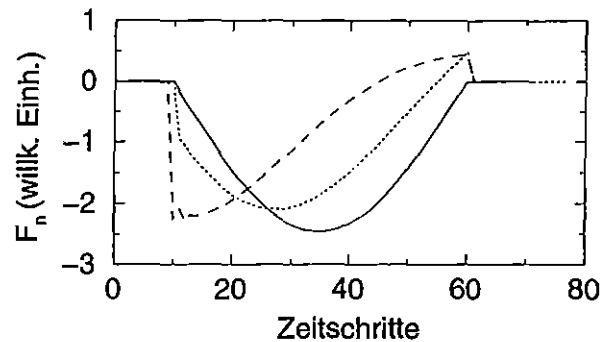


Abbildung 3.2: Verhalten der Normalkraft (3.14) während der Kollision für verschiedene Restitutionskoeffizienten. Durchgezogene Linie: $e_n = 0.99$, gepunktete Linie: $e_n = 0.6$, gestrichelte Linie: $e_n = 0.2$.

Nachteile der Kräfte mit $\beta = 0$

Kraftgesetze, in denen der Dämpfungsterm nicht von der Auslenkung abhängt ($\beta = 0$), weisen zwei Eigenschaften auf, die wenig physikalisch erscheinen. Diese treten umso stärker in Erscheinung, je größer die Dämpfungskonstante γ_n , d.h. je kleiner der Normalrestitutionskoeffizient e_n ist:

- Bei Kontaktbeginn weist F_n eine Diskontinuität auf, da der Dämpfungsterm dann diskontinuierlich von Null auf seinen Maximalwert $\gamma_n v_n^i$ geht, während der elastische Term noch nicht zur Kraft beiträgt.
- Gegen Kontaktende geht der Beitrag des elastischen Terms monoton gegen Null, während der Dämpfungsterm einen endlichen Wert bis zum Kontaktende behält, wo er wieder diskontinuierlich auf Null springt. Nun entfernen sich aber die Teilchen voneinander, so daß der Dämpfungsterm, der entgegen der Bewegungsrichtung wirkt, zu einer *attraktiven* Rückstellkraft führt.

Diese unphysikalischen Erscheinungen sind für den Fall der Normalkraft (3.14) in Abb. 3.2 illustriert. Sie können aus prinzipiellen Erwägungen als unschön empfunden werden; sie können aber auch zu unerwünschten Effekten führen, wenn die gesamte Kraft F_n zur Steuerung der Tangentialkraft benutzt wird, wie es meistens der Fall ist. Eine Abhilfe wäre hier zu schaffen, indem nur der elastische Anteil der Normalkraft, $k_n \xi^\alpha$, zur Steuerung der Tangentialkraft dient. Bei Verwendung der plastischen Rückstellkraft (3.26) werden diese Probleme von vornherein vermieden.

3.2 Tangentialkräfte

Die Diskussion der tangentialen Kraftgesetze erfordert eine Festlegung auf eine spezielle Normalkraft. Hier bietet sich die harmonische Kraft

$$F_n = -k_n \xi - \gamma_n \dot{\xi} \quad (3.14)$$

aufgrund ihrer Einfachheit und Robustheit besonders an; überdies wird bei ihrer Verwendung das Ergebnis einer schiefen Kollision nur von der Schiefe und nicht vom Wert von v_n^i abhängen. Die Parameter der Normalkraft sind wieder so gewählt, daß die Drakeschen Celluloseacetatkugeln beschrieben werden ($k_n = 7.32 \times 10^6$ N/m, $\gamma_n = 2.06$ kg/s $\Rightarrow e_n = 0.87$). Außerdem ist in allen Fällen, wo es nicht explizit anders vermerkt wird, der Reibungskoeffizient zu $\mu = 0.25$ gewählt.

Die Eigenschaften der im folgenden vorgestellten Tangentialkräfte werden mit Hilfe von MBF-Diagrammen (wie in Abschnitt 1.3.3 vorgestellt) direkt mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Zusätzlich wird der totale Restitutionskoeffizient

$$e = \sqrt{\frac{E_{\text{kin}}^f + E_{\text{rot}}^f}{E_{\text{kin}}^i + E_{\text{rot}}^i}} \quad (3.29)$$

im Schwerpunktssystem gemessen. Diese Größe spielt eine wichtige Rolle für die Dissipation granularer Temperatur im System. Da ihr Wert für alle, insbesondere für sehr schiefe Stöße interessant ist, wird e nicht gegen ψ^i aufgetragen (wodurch sehr schiefe Stöße ins Unendliche rücken), sondern gegen den Sinus des Stoßwinkels ϑ wie in Abschnitt 1.3.1 definiert. Dies hat den Vorteil, daß alle Stöße von frontal ($\sin \vartheta = 0$) bis streifend ($\sin \vartheta = 1$) übersichtlich dargestellt werden können.

3.2.1 Gleitreibung

Die einfachste Scherkraft [184, 203] wendet nur das Gesetz für Gleitreibung an:

$$F_s = -\mu |F_n| \cdot \text{sign}(v_s). \quad (3.30)$$

Offensichtlich kann diese Kraft keine Tangentialelastizität nachahmen, sie kann im Höchstfall v_s im Laufe des Kontakts auf Null abbremsen. Man beachte, daß (3.30) eine Unstetigkeit an der Stelle $v_s = 0$ hat: Wird $v_s \rightarrow 0$ wirklich erreicht, oszilliert F_s von Zeitschritt zu Zeitschritt zwischen positiven und negativen Werten. Dies hat für die Geschwindigkeit v_s aber keine weiteren Folgen, als daß auch sie im Gentakt um 0 herum oszilliert, wie in Abb. 3.3 durch eine Probesimulation illustriert. Die Amplitude der Oszillation geht dabei wegen $F_n \rightarrow 0$ gegen Ende des Kontakts wieder gegen Null.²

Das mit dieser Kraft erhaltene MBF-Diagramm ist in Abb. 3.4a für drei verschiedene μ gezeigt. Wie erwartet, stellt sich für geringe ψ^i der Rollfall ein ($\psi^f = 0$), während sich für große Schiefeparameter ein linearer Anstieg von ψ^f mit ψ^i ergibt. Der Übergang zwischen Rollfall und Gleitfall ist durch den Wert von μ bestimmt (2.8): Je größer μ ,

²Daß $F_n \rightarrow 0$ gegen Ende des Kontakts jedoch nicht immer gewährleistet ist, folgt aus Abschnitt 3.1.6!

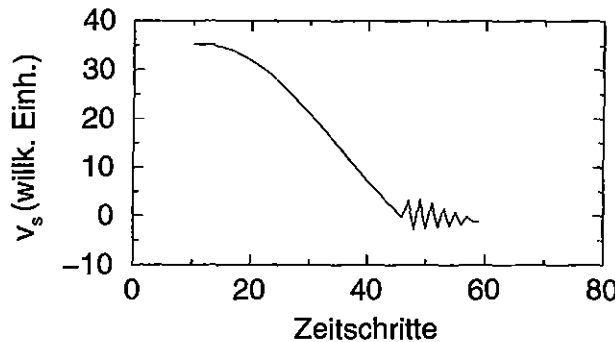


Abbildung 3.3: Verhalten der Schergeschwindigkeit bei Verwendung der Scherkraft (3.30) während einer Kollision unter dem Einfallswinkel $\vartheta = 27^\circ$ und $e_n = 0.9$, $\mu = 0.1$.

desto weiter in Richtung schiefe Stöße erstreckt sich der Rollfall. Dieses Kollisionsverhalten entspricht dem des in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten Kollisionsoperators, der das Waltonsche Kollisionsmodell verwirklicht, mit der speziellen Wahl $e_s = 0$.

Das $e(\sin\theta)$ -Diagramm ist in Abb. 3.5a dargestellt. Für frontale Kollisionen ($\sin\vartheta = 0$) ergibt sich, wie es sein sollte, $e = e_n$; für zunehmend schiefe Stöße gibt es zusätzlich zur Normaldissipation einen wachsenden Beitrag der Reibung zur totalen Dissipation. Erst für streifenden Einfall ($\sin\vartheta \rightarrow 1$) geht e wieder gegen 1, wie es zu erwarten ist.

3.2.2 Viskose Reibung

Eine andere Möglichkeit ist eine rein viskose Scherdämpfung der Form [35,192,208,213,221]

$$F_s = -\gamma_s v_s, \quad (3.31)$$

wobei γ_s eine Dämpfungskonstante ohne physikalische Interpretation ist. Diese Kraft führt zu konstantem $e_s > 0$ für alle ψ^i – der Rollfall tritt niemals ein (Abb. 3.4b). Das $e(\sin\vartheta)$ -Diagramm zeigt eine weitere Eigentümlichkeit der viskosen Reibung: der Restitutionskoeffizient e geht für streifende Kollisionen nicht gegen 1 zurück (Abb. 3.5b), eine sicher unphysikalische Erscheinung.

3.2.3 Regularisierte Gleitreibung

Die Unstetigkeit in (3.30) könnte unter Umständen bei besonders langanhaltenden Kontakten zu numerischen Instabilitäten führen: Um dies zu vermeiden, wurde in vielen Studien eine Kombination von (3.30) und (3.31) verwendet [81, 207, 209, 211, 212, 225, 226]:

$$F_s = -\min(\gamma_s |v_s|, \mu |F_n|) \cdot \text{sign}(v_s) \quad (3.32)$$

Man kann γ_s hier als technischen Parameter betrachten, der möglichst so groß gewählt werden sollte, daß die Eigenschaften dieser Kraft nicht wesentlich von jenen des Coulomb-Kraftgesetzes (3.30) abweichen. Abb. 3.4c zeigt das entsprechende MBF-Diagramm für verschiedene γ_s . Wie erwartet, nähert sich das Verhalten für steigende γ_s immer mehr dem des Coulomb-Kraftgesetzes (3.30) an. Gleiches gilt für $e(\sin \vartheta)$ (Abb. 3.5c). Offensichtlich ändert ein kleines γ_s hauptsächlich die Eigenschaften „mittelschiefer“ Kollisionen, die weniger dissipativ sind als entsprechende Stöße mit größerem γ_s ; im Grenzfall frontaler bzw. streifenden Stoßes kann sich γ_s nicht stark auswirken, weil dort $e(\sin \vartheta = 0) = e_n$ bzw. $e(\sin \vartheta \rightarrow 1) \rightarrow 1$ gelten muß.

3.2.4 Lineare Tangentialfeder

Keine der bisher vorgestellten Tangentialkräfte zeigt ein negatives e_s , wie es experimentell beobachtet wird. Ein weiterer Nachteil aller dieser Kräfte wird besonders in statischen oder quasi-statischen Systemen wichtig: Ein Haufen von Teilchen, die einem der Gesetze (3.30)–(3.32) gehorchen, ist unter äußeren Kräften und insbesondere unter Gravitation nicht stabil – in starkem Gegensatz zur Wirklichkeit. Stabilität würde erfordern, daß auch im Fall $v_s = 0$ noch endliche Scherkräfte herrschen können.

Beiden Mankos kann abgeholfen werden, wenn die in Abschnitt 1.3.3 besprochene Tangentialelastizität im Kraftgesetz berücksichtigt wird. Dies kann beispielsweise mit Hilfe einer tangentialen Feder bewerkstelligt werden, wie sie von Cundall und Strack [200] 1979 eingeführt und danach von vielen Autoren verwendet wurde [202, 206, 221, 223, 227]:

$$F_s = -\min(|k_s \zeta|, |\mu F_n|) \cdot \text{sign}(\zeta), \quad (3.33)$$

worin k_s die Federkonstante einer tangentialen Feder ist, die seit dem Zeitpunkt t_0 , zu dem der Kontakt erstmals auftrat, um ein Stück ζ ausgelenkt worden ist:

$$\zeta(t) = \int_{t_0}^t v_s(t') dt'. \quad (3.34)$$

Die tangentielle Feder bestimmt F_s , solange $|k_s \zeta| < |\mu F_n|$ ist, und bewirkt dann eine oszillatorische Bewegung um die Ruhelage $\zeta = 0$.

Schwingungsfrequenz des tangentialen Oszillators

Wir nehmen an, daß die Kugeln gleichen Radius und gleiche Masse haben, und trennen ζ gemäß

$$\zeta(t) = \int v_s(t') dt' = \underbrace{\int (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \vec{s} dt}_{s} + \underbrace{\int R(\omega_i + \omega_j) dt}_{R\Theta} \quad (3.35)$$

in einen Translationsanteil s und einen Rotationsanteil $R\Theta$. Die Beschleunigung des Translationsanteils erfolgt gemäß $\ddot{s} = -F_s/m_{\text{eff}} = -k_s \zeta/m_{\text{eff}}$, diejenige des Rotationsanteils gemäß $\ddot{\Theta} = -RF_s/I_{\text{eff}} = -k_s R \zeta/I_{\text{eff}}$. Hierbei ist $I_{\text{eff}} = I_i I_j / (I_i + I_j)$ das effektive Trägheitsmoment, und es gilt $I = 2/5 m R^2$ für homogene Kugeln. Die Gesamtbeschleunigung $\ddot{\zeta}$ ist also durch

$$\ddot{\zeta} = \ddot{s} + R\ddot{\Theta} = -\frac{k_s}{m_{\text{eff}}} \left(1 + \frac{m_{\text{eff}} R^2}{I_{\text{eff}}} \right) \zeta \quad (3.36)$$

gegeben, was eine Schwingungsfrequenz von

$$\omega_s = \sqrt{\frac{k_s}{m_{\text{eff}}} \left(1 + \frac{m_{\text{eff}} R^2}{I_{\text{eff}}}\right)} \quad (3.37)$$

oder eine halbe Periodenlänge von

$$t_s = \pi/\omega_s = \pi \left(\frac{k_s}{m_{\text{eff}}} \left(1 + \frac{m_{\text{eff}} R^2}{I_{\text{eff}}}\right) \right)^{-1/2}. \quad (3.38)$$

bedeutet. Unter der Voraussetzung, daß praktisch während des gesamten Stoßes die Tangentialfeder gewirkt hat, hängt die Phase der tangentialen Oszillation in dem Moment, zu dem der Kontakt endet, und also das Resultat eines Stoßes gegebener Schiefe, von dem Verhältnis $c = t_s/t_n$ ab. Einsetzen der harmonischen Kraft (3.14) und Auflösen nach k_s liefert für diesen Spezialfall

$$k_s = \frac{k_n}{c^2(1 + m_{\text{eff}} R^2/I_{\text{eff}})}. \quad (3.39)$$

Eine natürliche Wahl für das Periodenverhältnis c ist zunächst $c = 1$, so daß $k_s/k_n = 2/7$ wird. In Abb. 3.4d sind die mit (3.33) gewonnenen MBF-Diagramme für drei verschiedene Werte von k_s/k_n dargestellt. Im Falle $k_s/k_n = 2/7$ ergibt sich aufgrund der Tangentialfeder ein Regime konstanten negativen Tangentialrestitutionskoeffizienten e_s für geringe bis mittlere ψ^i , das dann für höhere ψ^i , wo nicht mehr die Tangentialfeder, sondern die Gleitreibung in (3.33) dominiert, in ein Gleitreibungsregime übergeht. Der Bereich, in dem eine Umkehr der initialen Tangentialgeschwindigkeit beobachtet wird $\psi^f < 0$, erstreckt sich von frontalen Stößen bis hin zu $\psi \approx 1.6$ ($\vartheta \approx 58^\circ$). Im Falle von $c \neq 1$ ($k_s/k_n \neq 2/7$) ist die Ausdehnung des Bereiches mit $\psi^f < 0$ unverändert und das Stoßverhalten im wesentlichen das gleiche. Es ergeben sich jedoch einige neue Details, beispielsweise für $k_s/k_n = 1$, wo man bei nahezu frontalen Kollisionen zunächst ein positives ψ^f beobachtet, bevor sich für schiefere Stöße Umkehr der Tangentialgeschwindigkeit einstellt. Ein Verhalten dieser Art wurde von Maw *et al.* theoretisch vorhergesagt. Die experimentellen Ergebnisse von Foerster *et al.* sind nicht präzise genug, um dieses Verhalten aufzulösen.

Die zugehörigen $e(\sin \vartheta)$ -Kurven sind in Abb. 3.5d dargestellt. Für das Dissipationsverhalten scheint der genaue Wert von k_s/k_n keine große Rolle zu spielen.

Probleme bei langanhaltenden Kontakten

Während die lineare Tangentialfeder also sowohl für Stabilität von statischen Packungen unter Gravitation als auch für ein realistisches Kollisionsverhalten sorgt, ist sie weit davon entfernt, eine gute Beschreibung für alle denkbaren Situationen zu liefern. Problematisch werden insbesondere langanhaltende Kontakte, in denen der Kontaktpunkt nicht mehr gut definiert ist, sondern durch Rollen seine Position auf den sich berührenden Kugeln ändert.

Betrachtet sei beispielsweise eine Kugel des Radius R , die wie beim Kegeln zum Zeitpunkt $t = t_0$ auf eine ebene Fläche gesetzt wird; die initiale Geschwindigkeit entlang der Fläche sei v_0 und die initiale Winkelgeschwindigkeit $\omega_0 = 0$. Man erwartet, daß aufgrund der Reibung die Kugel gebremst wird und Winkelgeschwindigkeit aufnimmt, bis $|v| = |\omega R|$ erreicht ist; anschließend verharrt sie in diesem Zustand und rollt ungebremst weiter. Durch

Anwendung von Gleichung (3.33) ergibt sich dagegen ein ganz anderes Verhalten. Gemäß Gleichung (3.34) wächst ζ monoton an, bis der Rollfall $|v| = |\omega R|$, $v_s = 0$ erreicht ist. Unabhängig davon, wie groß ζ zu diesem Zeitpunkt ist, hat $\min(|k_s \zeta|, \mu|F_n|)$ einen endlichen Wert, und die Scherkraft F_s wirkt derart, daß ω weiter wächst und v weiter sinkt. Die Relativgeschwindigkeit v_s wechselt nun ihr Vorzeichen und ζ beginnt zu sinken, bis schließlich $\zeta = 0$ durchlaufen wird und ζ sein Vorzeichen umkehrt. Man erhält also Oszillationen um den Zustand $\zeta = 0$, die aufgrund der Beschränkung von F_s durch $\mu|F_n|$ anharmonisch sind. Auch wenn das Vorzeichen von F_s statt durch ζ durch $\dot{\zeta} = v_s$ reguliert wird, ergibt sich unphysikalisches Verhalten. Als Quintessenz bleibt, daß auch ein Tangentialkraftgesetz, das in bestimmten Situationen „gute“ Resultate liefert, in anderen Situationen völlig versagen kann.

3.2.5 Variable Tangentialfeder

Ein weiteres Kraftgesetz, das zu Umkehr der Tangentialgeschwindigkeit führt, stammt von Walton und Braun [157]. Es wurde mit Hilfe der theoretischen Analyse von Mindlin und Deresiewicz [166] formuliert, genauer gesagt unter Verwendung von deren Ergebnissen zum Fall konstanter Normalkraft und variierender Tangentialkraft. Zwar ist bei einem schiefen Stoß die Normalkraft nicht wirklich konstant, doch in erster Näherung kann man annehmen, daß sie sich nur *langsam* ändert – jedenfalls langsam genug, daß sie von Zeitschritt zu Zeitschritt als konstant angesetzt werden kann. Dann lautet das Kraftgesetz

$$F_s = F'_s + k_s \cdot |\zeta - \zeta'|, \quad (3.40)$$

wobei gestrichene Größen sich auf den entsprechenden Wert im vorigen Zeitschritt beziehen. Bei konstantem k_s wäre dieses Kraftgesetz äquivalent zur linearen Feder (3.33); hier allerdings hängt die Federkonstante von der Vorgeschichte ab:

$$k_s = \begin{cases} k_s^0 \left(1 - \frac{F_s - F_s^*}{\mu F_n - F_s^*}\right)^{1/3} & \text{wenn } v_s \text{ in Richtung von } v_s^i \\ - k_s^0 \left(1 - \frac{F_s^* - F_s}{\mu F_n + F_s^*}\right)^{1/3} & \text{wenn } v_s \text{ in anderer Richtung.} \end{cases} \quad (3.41)$$

Hierbei bedeutet k_s^0 die initiale Federkonstante. F_s^* ist Null zu Beginn; wann immer die Richtung von v_s sich umdreht, wird $F_s^* = F_s$ gesetzt. Änderungen der Normalkraft während des Kontakts gehen über die Verwendung des jeweils aktuellen F_n in (3.41) ein. Laut der Theorie von Mindlin und Deresiewicz [166] ist die initiale Federkonstante k_s^0 mit der Hertzschen Federkonstanten k_n über

$$k_s^0 = k_n \frac{1 - \nu}{1 - \nu/2} \quad (3.42)$$

verknüpft. Die Poissonzahl ν ist etwa $1/3$ für die meisten Materialien, so daß $k_s^0/k_n \approx 2/3$.

In Abb. 3.4e sind nun die MBF-Diagramme zu (3.40) mit verschiedenen k_s^0/k_n abgebildet. Im wesentlichen ergeben sich sehr ähnliche Resultate wie mit Kraft (3.33); hier wie dort

ist es nur eine Frage des verwendeten Verhältnisses der Federkonstanten, wie genau die experimentellen Ergebnisse getroffen werden. Auch für die Dissipation $e(\sin \vartheta)$ (Abb. 3.5e) ergeben sich praktisch die gleichen Resultate wie bei der linearen Federkraft (3.33). Obwohl also das Walton-Braun-Kraftgesetz (3.40) die mit Abstand größte Realitätsnähe (aber auch Komplexität) aller hier diskutierten Gesetze hat, ergibt sich daraus kein unmittelbarer Vorteil bei der Simulation von schiefen Kollisionen.

3.2.6 Sägezahnkraft

Brilliantov *et al.* [151] gehen davon aus, daß der Impulsübertrag in tangentialer Richtung (und also die effektive tangentielle Kraft) von der Mikrorauigkeit der beiden in Kontakt befindlichen Oberflächen vermittelt wird. Lokale Unebenheiten können nur einer bestimmten äußeren Kraft widerstehen und geben nach, wenn diese Grenzkraft überschritten wird. Dieses Modell führt auf die folgende Tangentialkraft:

$$F_s = -\mu F_n \left(\frac{\zeta}{\zeta_0} - \left\lfloor \frac{\zeta}{\zeta_0} \right\rfloor \right) \quad (3.43)$$

wobei $\lfloor \cdot \rfloor$ den ganzzahligen Anteil bedeutet und ζ_0 eine Länge ist, die sich ebenso wie der Reibungskoeffizient μ aus Materialkonstanten und der Oberflächenrauigkeit ergibt. Gleichung (3.43) ist eine Sägezahnfunktion in ζ mit der Periode ζ_0 . Offensichtlich muß ζ_0 viel kleiner als das die maximale tangentielle Auslenkung ζ^f sein, die kurz vor dem Ende des Kontakts auftritt. Typische Werte von ζ^f , wie sie in den Beispielsimulationen dieses Kapitels auftreten, liegen zwischen etwa 10^{-7} m und 10^{-5} m (von nahezu frontalen zu nahezu streifenden Kollisionen). Das MBF-Diagramm der Sägezahnkraft (3.43) ist für $\zeta_0 = 10^{-8}$ m in Abb. 3.4f gezeigt (Änderung von ζ_0 auf 10^{-7} m oder 10^{-9} m ändert die Kurve nicht sichtbar). Man erhält Umkehr der Tangentialgeschwindigkeit für nahezu frontale Kollisionen, aber die Ausdehnung dieser Region ist kleiner als mit den Kräften (3.33) und (3.40). Die Dissipationskurve $e(\sin \vartheta)$ (Abb. 3.5f) liegt etwas über denen der Kräfte (3.33) und (3.40), besonders in der Gegend $\sin \vartheta \approx 0.7$.

3.2.7 Kombinationen mit anderen Rückstellkräften

Abschließend stellt sich die Frage, inwiefern die bisher besprochenen Kollisionseigenschaften sich ändern, wenn andere spezielle Wahlen der Normalkraft F_n als die harmonische Kraft (3.14) mit den diskutierten Tangentialkräften F_s kombiniert werden. Denn offensichtlich hängt ja das Ergebnis einer schiefen Kollision wegen

$$v_s^f - v_s^i = \Delta v \propto \int_0^{t_n} F_s dt. \quad (3.44)$$

sowohl über $F_s = f(F_n)$ als auch über $t_n = f(F_n)$ von der gewählten Kraft F_n ab.

Um die Behandlung bündig zu machen, soll dieser Frage nur an zwei Beispielen, der nicht-elastischen Tangentialkraft (3.30) und der elastischen Tangentialkraft (3.33), nachgegangen werden. Für andere nichtelastische bzw. elastische Tangentialkräfte gilt dann jeweils entsprechendes.

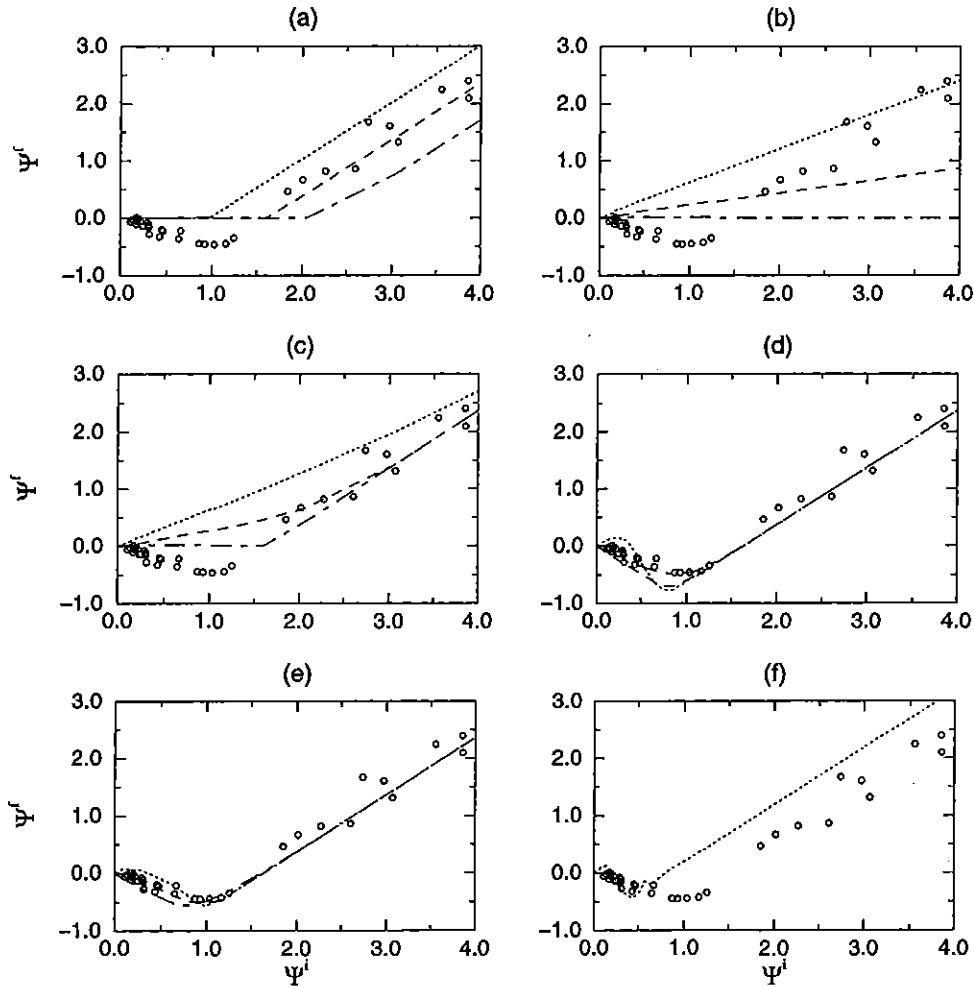


Abbildung 3.4: MBF-Diagramme für die verschiedenen Tangentialkräfte. Kreise: Experimentelle Ergebnisse von Foerster et al. [156] an Celluloseacetat-Kugeln. Punkt-, Strich- und Strichpunktlinien stehen jeweils für

- (a) Gleitreibung (3.30) mit $\mu = 0.15, 0.25, 0.35$
- (b) Viskose Reibung (3.31) mit $\gamma_s = 1, 3, 20 \text{ kg/s}$
- (c) Regularisierte Gleitreibung (3.32) mit $\gamma_s = 1, 3, 20 \text{ kg/s}$
- (d) Lineare Tangentialfeder (3.33) mit $k_s/k_n = 1, 2/7, 1/5$
- (e) Variable Tangentialfeder (3.40) mit $k_s^0/k_n = 1, 2/3, 1/3$
- (f) Sägezahnkraft (3.43) mit $\zeta_0 = 10^{-8}$.

Wo nicht anders vermerkt, ist $\mu = 0.25$.

Für die nichtelastische Tangentialkraft (3.30) ist der Einfluß der speziellen Normalkräfte, solange letztere jeweils an das gleiche Material angepaßt wurden, relativ gering. Die Begründung liegt darin, daß bei dieser Tangentialkraft $F_s \propto F_n$ ist, und das Integral $\int_{t_n} F_n$ ist bei konstantem e_n unabhängig von F_n . Das gleiche muß daher für das Integral in Gleichung (3.44) gelten. Bei Verwendung eines Kraftgesetzes, bei dem der Wert des Normalrestitu-

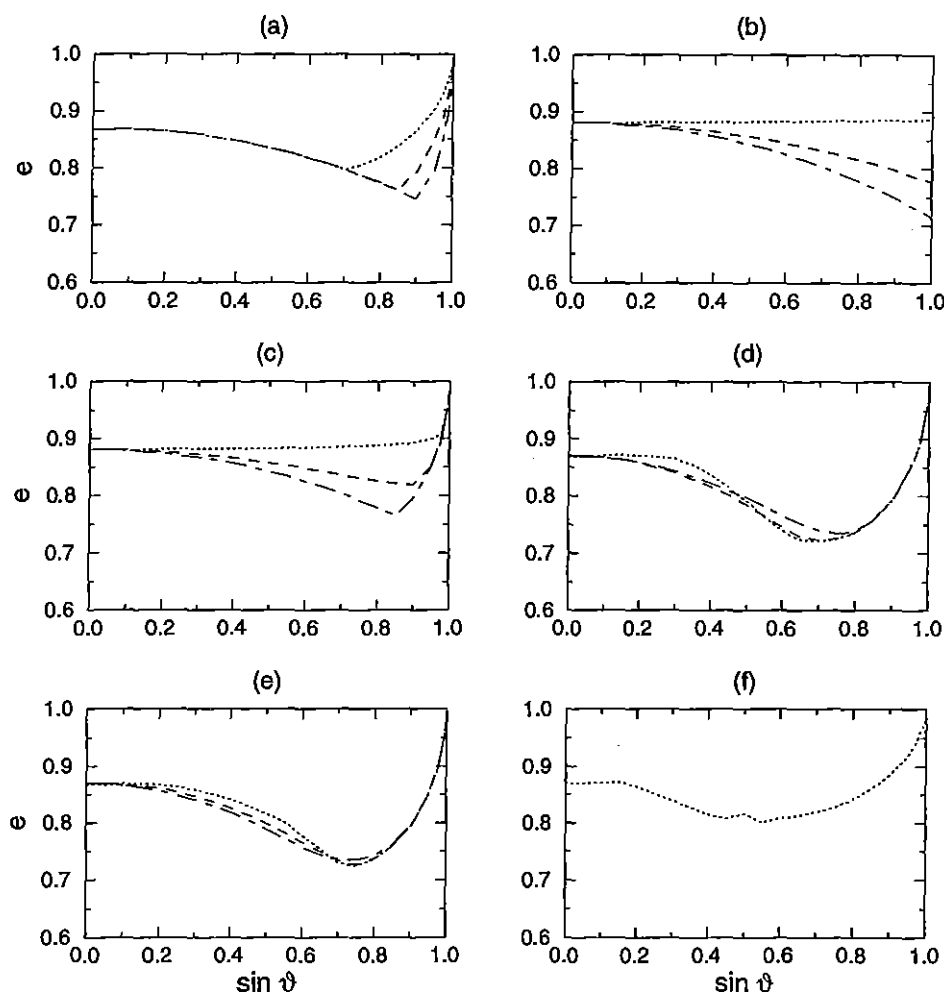


Abbildung 3.5: $e(\sin \vartheta)$ -Diagramme für die verschiedenen Tangentialkräfte. Alle Bezeichnungen analog zu Abb. 3.4.

tionskoeffizienten e_n von v_n^i abhängt, muß man natürlich eine gewisse Abhängigkeit des Resultats einer Kollision von v_n^i erwarten. In der Praxis ist diese aber so schwach, daß sich keine sichtbaren Veränderungen beispielsweise im MBF-Diagramm über einen weiten Bereich verschiedener v_n^i ergeben.

Etwas anders liegt der Fall bei dem elastischen Kraftgesetz (3.33). Hier hängt, wie bereits besprochen, das Resultat eines schiefen Stoßes wesentlich vom Verhältnis der Oszillationsperioden in tangentialer und normaler Richtung, $c = t_s/t_n$, ab. Wenn ein Kraftgesetz verwendet wird, das zu einer Abhängigkeit der Kontaktzeit t_n von der Aufprallgeschwindigkeit v_n^i führt, variiert c bei fest gewähltem k_s ebenfalls mit v_n^i . Die Auswirkungen dieser Tatsache sind in einem MBF-Diagramm (Abb. 3.6) illustriert, in dem die elastische Tangentialkraft (3.33) zusammen mit der Kuwabara-Kono-Kraft (1.21) für verschiedene v_n^i verwendet wurde. Der Wert von k_s wurde so gewählt, daß sich mit den Parametern der Drakeschen Celluloseacetat-Kugeln bei einer Aufprallgeschwindigkeit von $v_n^i = 1$ m/s gerade $c = 1$ ergibt. Offensichtlich verändert die Aufprallgeschwindigkeit das Kollisions-

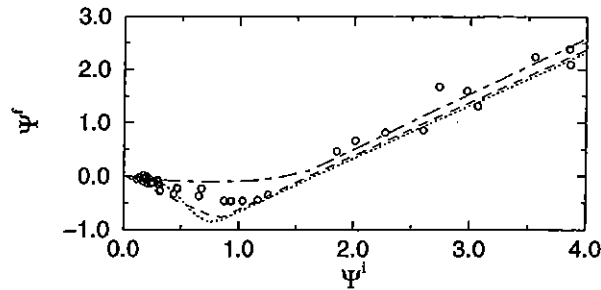


Abbildung 3.6: MBF-Diagramm für die Kombination der Hertz-Kuwabara-Kono-Kraft (1.21) mit der linearen Tangentialfeder (3.33) und $k_s = 9.43 \times 10^4$ N/m. Aufprallgeschwindigkeiten: $v_n^i = 0.1$ m/s (gepunktete Linie), 1.0 m/s (gestrichelte Linie), 10.0 m/s (Strichpunktlinie). Kreise: Experimentelle Ergebnisse [156].

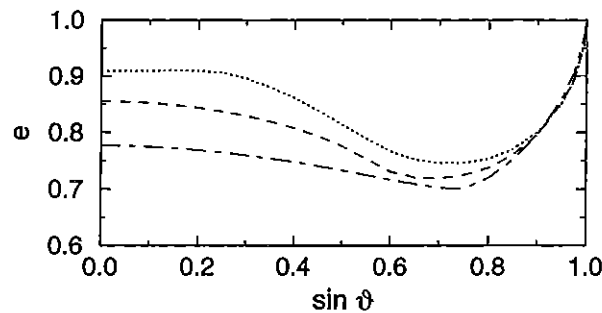


Abbildung 3.7: $e(\sin \vartheta)$ -Diagramm für die Kombination der Hertz-Kuwabara-Kono-Kraft (1.21) mit der linearen Tangentialfeder (3.33). Parameter wie in Abb. 3.6.

verhalten deutlich. Auf der anderen Seite läßt sich der Abbildung auch entnehmen, daß man für eingeschränkte Geschwindigkeitsbereiche durch die Kombination der elastischen Tangentialkraft (3.33) mit (beispielsweise) der Kuwabara-Kono-Kraft (1.21) durchaus eine gute Reproduktion experimenteller Kollisionsergebnisse erhält – wenn die tangentialen Federkonstante k_s mit Bedacht gewählt wird.

Da e_n sich bei Verwendung einer nichtlinearen Normalkraft mit v_n^i verändert, muß sich das $e(\sin \vartheta)$ -Diagramm dann für *alle* Tangentialkräfte mit v_n^i verändern. Dies ist für die gleichen Parameter wie oben in Abb. 3.7 illustriert.

3.2.8 Diskussion

Die hier vorgestellten Untersuchungen beziehen sich allein auf den freien Stoß zweier Teilchen. In dieser Situation scheinen realitätsnahe Tangentialkräfte wie die variable Tan-

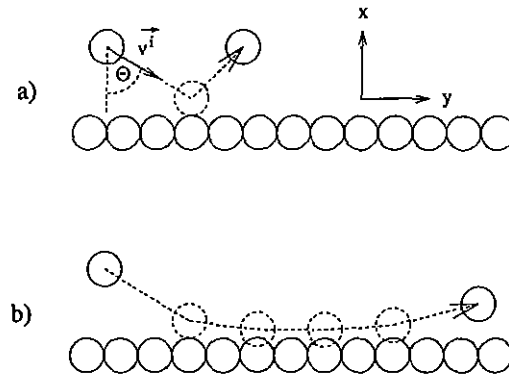


Abbildung 3.8: Wechselwirkung des freien Teilchens mit einer rauhen Wand

a) im Fall $v^i \ll v_b$, b) im Fall $v^i \gg v_b$

gentialfeder nach Walton und Braun (3.40) keine großen Vorteile gegenüber einfacheren Kräften wie der linearen Tangentialfeder (3.33) zu besitzen. In anderen Situationen, etwa in quasistatischen Systemen mit langanhaltenden Kontakten, auf die zusätzlich äußere Kräfte einwirken, könnte die Walton-Braun-Kraft, oder noch genauere Implementierungen der Resultate von Mindlin und Deresiewicz (siehe z.B. [228, 229]), jedoch bessere Resultate liefern als andere Kraftgesetze. Dieser Fall konnte im Rahmen der Arbeit nicht untersucht werden. Sadd *et al.* [230] haben eine Untersuchung der Eigenschaften verschiedener Kraftgesetze für den Fall dichter Systeme mit langanhaltenden Kontakten durchgeführt.

3.3 Wechselwirkung mit einer rauhen Wand: Bremsversagen und Notbremse

Betrachtet sei der Aufprall eines einzelnen Teilchens auf eine aus starren Wandteilchen bestehende Wand (Abb. 3.8). Diese Situation ist in einer Rohrgeometrie wie der in dieser Arbeit betrachteten (vgl. Abb. 4.1) sehr häufig und von großer Bedeutung für das Systemverhalten. Die y -Komponente der Einfallsgeschwindigkeit läßt sich mit der typischen Axialgeschwindigkeit in Verbindung bringen (und diese wiederum mit der Wurzel der granularen Temperatur, vgl. Kapitel 4) und die x -Komponente mit der typischen Radialgeschwindigkeit. Mikroskopisch hat man ganz ähnliche Verhältnisse wie beim streifenden Zusammenstoß zweier Kugeln (Abschnitt 2.2.3.2), nur daß hier die ortsfeste Wandkugel, die vom freien Teilchen getroffen wird, unendliche Masse hat. Wieder fragen wir nach einem Geschwindigkeitsverlust (der *Bremsfunktion*), hier dem Verlust an axialer Geschwindigkeit Δv_y , als Funktion der Aufprallgeschwindigkeit \bar{v}^i . Wie in Abschnitt 2.2.3.2 diskutiert, steigt die Bremsfunktion bis etwa zur kritischen Einfallsgeschwindigkeit $v^i = |\bar{v}^i| = v_b$ proportional zu v^i an, und das einfallende Teilchen wird am Wandteilchen praktisch reflektiert (Abb. 3.8a). Übertrifft die Einfallsgeschwindigkeit den kritischen Wert v_b , tritt Bremsversagen ein, d.h. die Bremsfunktion fällt wie $\Delta v_y \propto 1/v^i$ ab. Darüber hinaus wird das freie Teilchen im Bremsversagen-Regime aber auch nicht mehr am Wandteilchen reflektiert, sondern wird mit steigendem v^i immer weniger von seiner ursprünglichen Bahn abgelenkt und durchquert das Wandteilchen bei sehr hohen v^i fast ungehindert. In dieser

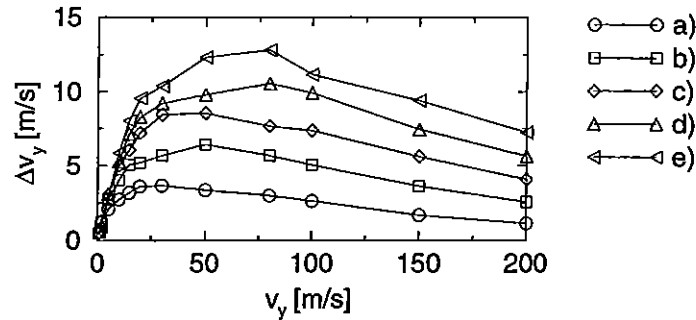


Abbildung 3.9: Bremsversagen an der rauhen Wand für die Drakeschen Celluloseacetat-Kugeln mit dem realistischen Wert $t_n = 10^{-5}$ s.

a) $v_x = 1$ m/s, b) $v_x = 21$ m/s, c) $v_x = 3$ m/s, d) $v_x = 4$ m/s, e) $v_x = 5$ m/s.

Situation trifft es aber anschließend gleich auf das nächste Wandteilchen, und wenn es auch dieses noch zu durchqueren vermag, trifft es auf ein drittes und eventuell weitere, bis es letztlich wieder aus der Wand zurückgedrängt wird (Abb. 3.8b). Bei jedem dieser Kontakte geht ein wenig Axialgeschwindigkeit verloren (und zwar umso mehr, je höher μ und je niedriger e_n liegen); die Anzahl der Kontakte nimmt aber mit steigendem v^i zu. Dies bedeutet, daß für sehr große Einfallsgeschwindigkeiten v^i die Bremsfunktion $\Delta v_y(v^i)$ wieder mit v^i steigen muß, so daß es eine Art Notbremse gibt.

Um dieses Verhalten nachzuprüfen, wurde eine Situation wie in Abb. 3.8 durch TD-Simulationen realisiert. Im Hinblick auf die praktische Anwendung wird die Bremsung Δv_y nicht gegen v^i und den Einfallswinkel Θ (der hier als effektiver Einfallswinkel gegen die Einhüllende der Wandteilchen definiert, also nicht identisch mit dem Winkel ϑ aus Abb. 2.3 ist), sondern gegen die Größen v_y und v_x aufgetragen, die sich im Rohrfluß als typische Axial- bzw. Radialgeschwindigkeit interpretieren lassen. Wie man sich leicht klarmacht, hängt der Winkel ϑ aus Abb. 2.3 und damit das Ergebnis eines Aufpralls bei festem v_y und v_x noch stark vom genauen Auftreffpunkt ab. Deshalb wurde zu jedem Paar (v_x, v_y) die Startposition des freien Teilchens über 10 verschiedene Punkte variiert, die sich jeweils durch Verschiebung des vorigen Startpunkts um $d/10$ in y -Richtung ergaben. Auf diese Weise wurde die gesamte „Wellenlänge“ der rauhen Wand abgetastet, und Δv_y ergab sich durch Mittelung über die zu jedem Startpunkt gemessenen Geschwindigkeitsverluste. Die verwendeten Kraftgesetze waren die harmonische Normalkraft (3.14) und die Gleitreibungskraft (3.30); die freien Parameter wurden wieder so gewählt, daß die Eigenschaften der Drakeschen Celluloseacetatkugeln möglichst gut reproduziert werden ($t_n = 10^{-5}$ s, $e_n = 0.87$, $\mu = 0.23$). Das Ergebnis ist in Abb. 3.9 dargestellt. Es ist klar zu sehen, wie zunächst Δv_y linear mit v_y ansteigt (physikalisches Regime), dann aber, wenn auch schon bei einer relativ hohen Einfallsgeschwindigkeit, durch ein Maximum geht und wieder abfällt (Bremsversagen). Das Maximum verschiebt sich mit wachsendem v_x zu höheren v_y , wie es zu erwarten ist (der kritische Einfallswinkel $\Theta = \arctan(v_y/v_x)$ muß in etwa konstant bleiben). Das Notbremsen-Regime liegt hier bei Geschwindigkeiten weit über der Schallgeschwindigkeit in Luft und wurde daher nicht mehr dargestellt.

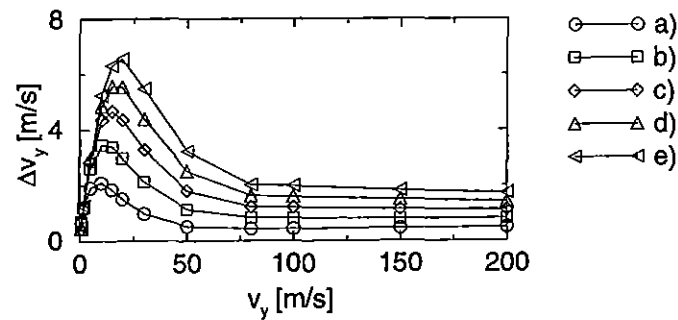


Abbildung 3.10: Bremsversagen an der rauhen Wand für die Drakeschen Celluloseacetat-Kugeln mit dem höheren Wert $t_n = 10^{-4}$ s.

a) $v_x = 1$ m/s, b) $v_x = 2$ m/s, c) $v_x = 3$ m/s, d) $v_x = 4$ m/s, e) $v_x = 5$ m/s.

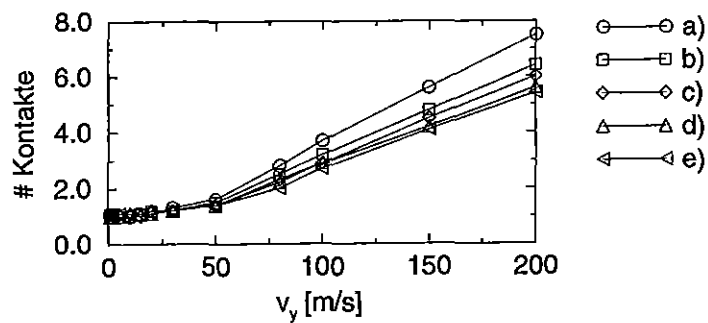


Abbildung 3.11: Anzahl der Kontakte des auf die Wand prallenden Teilchens. Parameter wie in Abb. 3.10.

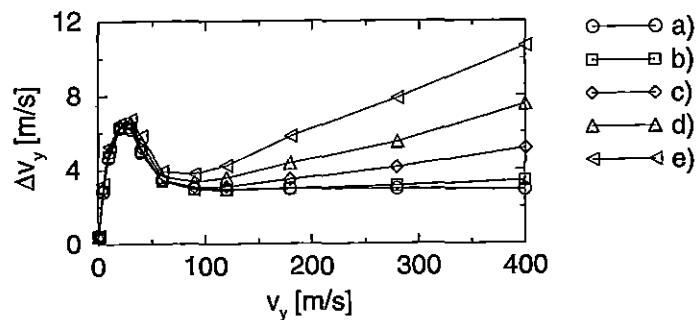


Abbildung 3.12: Bremsversagen an der rauhen Wand für Kugeln mit $t_n = 10^{-4}$ s und $\mu = 0.5$, die mit $v_x = 0.3$ m/s auf die Wand prallen.

a) $e_n = 0.99$, b) $e_n = 0.9$, c) $e_n = 0.8$, d) $e_n = 0.7$, e) $e_n = 0.6$.

Wird t_n gegenüber dem realistischen Wert vergrößert, etwa um Rechenzeit zu sparen, setzt Bremsversagen früher ein, so daß das Maximum nach links wandert und kleiner wird (Abb. 3.10). Das eigentliche Notbremsen-Regime ist hier bereits ab einer Einfallsgeschwindigkeit von $v_y \approx 50$ m/s erreicht, wie man Abb. 3.11 entnehmen kann; jedoch liegen hier der Reibungskoeffizient μ zu niedrig und der Restitutionskoeffizient e_n zu hoch, als daß sich eine bedeutende Bremsung im dargestellten Geschwindigkeitsbereich des Notbremsen-Regimes ergäbe. Der Einfluß beispielsweise des Restitutionskoeffizienten wird in Abb. 3.12 deutlich, wo die Bremsfunktion für konstantes v_x , aber variierendes e_n aufgetragen wurde. Hier tritt der erneute Anstieg der Bremsfunktion im Bremsversagen-Regime klar zutage.

Wird t_n noch weiter erhöht, setzt sich der Trend zu früherem Einsetzen von Bremsversagen natürlich fort. Zu beachten ist jedoch, daß Bremsversagen für jeden Wert von t_n auftritt, auch für beliebig kleine (bei entsprechend hohen Einfallsgeschwindigkeiten v_y).

Aus einem Verhalten der Bremsfunktion wie in Abb. 3.9, 3.10 und 3.12 gezeigt können offensichtlich Artefakte in TD-Simulationen resultieren. Diese werden in Abschnitt 5.1.1 im Lichte der dann zur Verfügung stehenden Gleichungen zur Beschreibung des verdünnten Rohrflusses diskutiert.

Kapitel 4

Einfache Theorie des homogenen granularen Rohrflusses

In diesem Kapitel wenden wir uns einem konkreten Beispiel zu, dem Fluß granularer Materie geringer Packungsdichte durch ein senkrechtes Rohr mit rauhen Wänden (Abb. 4.1). Im Sinne der Unterteilung aus Abschnitt 1.2.2 handelt es sich hier um einen granularen Fluß im volldynamischen Regime. Der granularen Temperatur und ihrer Kopplung an die Scherrate kommt dann eine besondere Bedeutung zu. Kinetische und Kontinuumstheorien sind in mehreren Untersuchungen auf eine derartige Geometrie angewandt worden [42, 100, 102, 105, 106, 114, 121]. Aufgrund der komplizierten Natur der entstehenden Gleichungen konzentrierten sich diese Arbeiten auf stationäre Strömungsprofile in wenigen ausgesuchten Fällen; in keinem Fall konnte eine explizite Abhängigkeit etwa der mittleren Axialgeschwindigkeit von den äußeren Parametern wie der Rohrbreite oder der Packungsdichte angegeben werden.

Hier soll nun der alternative Weg beschritten werden, für den wenn auch unrealistischen Spezialfall homogenen granularen Rohrflusses zwei einfache Gleichungen abzuleiten. Diese erlauben eine Berechnung nicht nur der Transienten, sondern auch der stationären Zustände in ihrer expliziten Abhängigkeit von den äußeren Parametern Rohrbreite und Packungsdichte. In qualitativer Form können auch Abhängigkeiten von weiteren Parametern wie Teilcheninelastizität und Wandrauhigkeit angegeben werden. Die entsprechenden Voraussagen werden durch ED-Simulationen getestet. Teile dieses Kapitels werden in Kürze als Vorabveröffentlichung erscheinen [231], eine weitere Veröffentlichung ist in Vorbereitung.

Zunächst sind einige Anmerkungen zur Homogenität bzw. Nichthomogenität granularer Flüsse sowie eine genauere Definition des betrachteten Systems angebracht.

4.1 Vorbemerkungen

4.1.1 Zur Annahme der Homogenität

Aus vielen theoretischen und experimentellen Untersuchungen ist bekannt, daß es perfekt homogenen granularen Fluß eigentlich nicht gibt. Reale granulare Rohrflüsse weisen auf großen Längenskalen sowohl axiale als auch radiale Inhomogenitäten auf. Die radiale Inhomogenität ist hauptsächlich eine Folge der räumlichen Struktur der Quellen und Senken der granularen Temperatur, wie in diesem Kapitel deutlich werden wird. Die axiale Inhomogenität dagegen ist eine Folge der bereits im ersten Kapitel angesprochenen strukturellen Instabilität in fließenden granularen Medien, die sich umso stärker bemerkbar macht, je größer die Inelastizität der Teilchenkollisionen, je größer die Teilchendichte und je größer das betrachtete System ist [37–44]. Beide Inhomogenitäten müssen in einer realistischen Theorie granularen Rohrflusses auf großen Längenskalen berücksichtigt sein.

Durch die axiale Inhomogenität entstehen für die Interpretation von Meßergebnissen an realen oder simulierten Systemen gewisse Schwierigkeiten. Es ist leicht einzusehen, daß axiale Inhomogenitäten eine Art Korrelationslänge definieren. Wenn Simulationen in einer Rechenzelle oder Experimente in einem Rohr durchgeführt werden, deren axiale Länge nicht entweder sehr groß oder sehr klein gegen diese Korrelationslänge sind, sind Effekte aufgrund der endlichen Systemgröße (*finite-size-Effekte*) zu erwarten. Für den Fall großer Längen zeigten Sanders und Ackermann [38], daß ein Seitenverhältnis von $L/W \approx 50$ noch nicht genügt, um den Einfluß der Rechenzellengröße auf die Resultate gänzlich auszuschalten. Es wäre also sehr aufwendig, Simulationen durchzuführen, in denen keine solchen Effekte mehr auftreten. Macht man dagegen die Rechenzelle sehr kurz, so wird die axiale Inhomogenität künstlich unterdrückt.

In dieser wie in vielen anderen Arbeiten wird der Ansatz verfolgt, daß in realen, axial inhomogenen Systemen das granulare Material auf kurzen axialen Längenskalen als lokal homogen betrachtet werden kann. Es wird weiter angenommen, daß die Zeitentwicklung der lokal homogenen Sektionen des langen Rohrs eigenen Gesetzmäßigkeiten folgt, die es hier zu behandeln gilt. Sind diese bekannt, wird die Zeitentwicklung auf großen Längenskalen der Behandlung durch andere Formalismen, beispielsweise dem der kinematischen Wellen, zugänglich (s. Abschnitt 5.5.1). Dieser wurde für den granularen Rohrfluß bereits (unter Zugrundelegung von *ad-hoc*-Gesetzmäßigkeiten) erfolgreich angewendet [221, 232–235]. Hier wird dagegen versucht, die Gesetzmäßigkeiten lokal homogener Rohrsektionen durch eine explizite Analyse der zugrundeliegenden mikroskopischen Physik abzuleiten.

Um die Analyse einfach zu halten, wird die radiale Inhomogenität zunächst ebenfalls vernachlässigt. Das betrachtete System ist also völlig homogen. Diese Annahme ist in verdünnten und dichten Systemen in recht guter Näherung erfüllt und bedeutet insbesondere, daß *alle Scherung an der Wand stattfindet* (dies ist sozusagen das andere Extrem zur ebenfalls häufig verwendeten Hypothese, die Fließgeschwindigkeit verschwinde an der Wand). Mitteldichte Systeme dagegen zeigen meist bedeutende Scherraten auch weit von der Wand entfernt und müssen daher auf einer anderen Basis beschrieben werden. In Abschnitt 4.2 werden durch Betrachtung der Kollisionsprozesse an der Wand die Gleichungen für zwei wichtige Flußvariable abgeleitet, wobei das Systeminnere als ein effektives Medium betrachtet wird, in dem Spannungen nur in zu vernachlässigender Weise durch Kollisionen

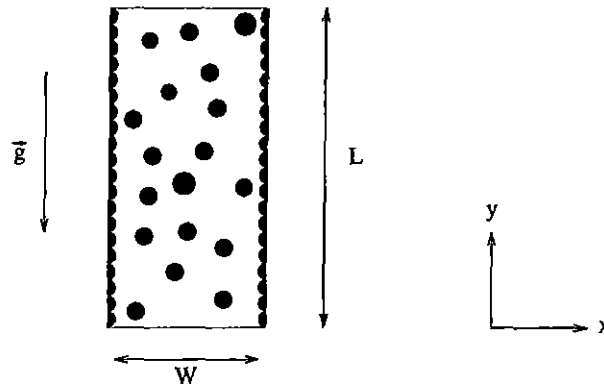


Abbildung 4.1: Polydisperse Teilchen fallen unter dem Einfluß der Schwerkraft durch ein Rohr mit rauhen Wänden.

erzeugt werden (also entweder durch Teilchentransport – im verdünnten Fall – oder durch Reibung – im dichten Fall).

4.1.2 Definition des Systems

Das betrachtete granulare Material besteht aus leicht polydispersen, dreidimensionalen Kugeln, die in einem zweidimensionalen Rohr mit der Gravitationsbeschleunigung $\vec{g} = (0, g)$ nach unten fallen (Abb. 4.1). Der mittlere Durchmesser der Körnchen ist d , die Standardabweichung beträgt $\sigma_d = 0.05d$. Die Masse eines Körnchens mit Durchmesser d ist $m = 1/6 \pi \rho d^3$, wobei ρ die Massendichte ist. Alle Größen werden in natürlichen Einheiten gemessen, die hier durch $d = g = m = 1$ definiert sind. Geschwindigkeiten haben also die Einheit \sqrt{gd} , Zeiten die Einheit $\sqrt{d/g}$ und so fort. Diese Einheiten werden im folgenden nur dann explizit angegeben, wenn es die Klarheit erhöht, in den meisten Fällen aber unterdrückt.

Die Wände des Rohrs sind aus ortsfesten Wandteilchen des Durchmessers d aufgebaut. Die Rechenzelle ist ein Rohrstück der (ganzzahligen) Länge L und der Breite W . In y -Richtung werden periodische Randbedingungen angewendet. Die Konzentration der Teilchen in der Rechenzelle wird durch die zweidimensionale Packungsdichte η beschrieben:

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\text{Gesamtfläche aller Teilchen}}{\text{Fläche der Rechenzelle}} \\ &= \frac{\pi \sum_{i=1}^N d_i^2}{4LW}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Mit der Fläche eines Teilchens ist hierbei die Fläche des Großkreises auf der Teilchenkugel gemeint. Eine näherungsweise Beziehung zwischen η und N , der Zahl der Teilchen in der Rechenzelle, ist durch

$$N \approx 4LW\eta/\pi d^2 \quad (4.2)$$

gegeben. Diese Relation ist exakt für monodisperse Systeme; in einem leicht polydispersen System wird N etwas überschätzt. Im folgenden gelten die verwendeten Materialparameter e_n , μ und e_s jeweils sowohl für Kollisionen zwischen freien Teilchen als auch für Teilchen-Wand-Kollisionen. Der Tangentialrestitutionskoeffizient e_s hat dabei stets den Wert $e_s = 0$.

4.2 Herleitung der Gleichungen

Betrachtet sei ein granulares System, das zu einem Zeitpunkt t_0 mit bestimmten Anfangsbedingungen für Teilchenpositionen, Geschwindigkeiten etc. seiner Dynamik überlassen wird. Von allen sich nun mit der Zeit entwickelnden Observablen interessieren uns nur zwei wichtige charakteristische Geschwindigkeiten: Die mittlere axiale Geschwindigkeit

$$v(t) := |\langle v_y(t) \rangle| \quad (4.3)$$

und die Wurzel der granularen Temperatur T_g (1.1), die mittlere thermische Geschwindigkeit

$$\sigma(t) := \sqrt{\langle \vec{v}^2(t) \rangle - \langle \vec{v}(t) \rangle^2}. \quad (4.4)$$

Hier bezeichnet $\langle \cdot \rangle$ das Mittel über alle Teilchen in der Rechenzelle. Über die Rolle als mittlere „thermische“ Geschwindigkeit hinaus ist σ auch ein Maß für den mittleren Betrag der Relativgeschwindigkeit der Teilchen sowie, falls das Verhältnis zwischen radialen und axialen thermischen Geschwindigkeiten als konstant angesehen werden kann, für den mittleren Betrag der Radialgeschwindigkeit der Teilchen. Diese Zusammenhänge werden im folgenden bei der Herleitung der Ratengleichungen für v und σ verwendet.

Alle Änderungen im Zustand des Systems werden durch Gravitation oder durch Kollisionen hervorgerufen. Ihre Rolle für v und σ wird nun im einzelnen analysiert.

- Zwischen Kollisionen beschleunigt die Gravitation alle Teilchen gleichmäßig in axialer Richtung. Sie erhöht also v , läßt jedoch σ unverändert.
- Bei Kollisionen zwischen zwei freien Teilchen gilt der Impulserhaltungssatz. Daraus folgt, daß die Schwerpunktgeschwindigkeit der beiden kollidierenden Teilchen, also die mittlere Geschwindigkeit v aller Teilchen, nicht durch diesen Stoß verändert wird. Wegen der Inelastizität der Korn-Korn-Stöße gilt jedoch kein Energieerhaltungssatz, so daß die Relativgeschwindigkeit der kollidierenden Teilchen, und daher die thermische Geschwindigkeit σ , nach dem Stoß geringer ist als vorher. Es ist zu beachten, daß für inhomogene Flüsse, wo auch im Inneren des Systems nichtverschwindende Scherraten $\partial v_y / \partial x$ herrschen, auch dort aus der lokalen Schergeschwindigkeit thermische Geschwindigkeit erzeugt wird. Der Mechanismus der Temperaturverringerung durch Kollisionen soll im folgenden *dissipative Kühlung* genannt werden.
- Bei Kollisionen eines freien Teilchen mit einem starren Wandteilchen gilt weder Energieerhaltung noch Impulserhaltung, so daß sowohl v als auch σ nach dem Stoß verändert sind. Die Reibung an der Wand verringert v . Auf der anderen Seite sorgt die Rauigkeit der Wand dafür, daß im Mittel bei einem Wandstoß etwas mittlere Geschwindigkeit v in thermische Geschwindigkeit σ umgewandelt wird, so daß sich σ erhöht. Mit anderen Worten wirkt die Wand als Bremse, und wie eine wirkliche Bremse erzeugt sie auch „Temperatur“, also thermische Geschwindigkeit.

Die Änderungsraten von v und σ lassen sich genauer spezifizieren.

4.2.1 Änderungsrate der mittleren Axialgeschwindigkeit

Die Gewinnrate der mittleren Axialgeschwindigkeit v ist einfach die Gravitationsbeschleunigung g . Verluste an mittlerer Axialgeschwindigkeit treten dagegen bei Wandkontakten auf, und zwar ist die Verlustrate umso höher, je häufiger solche Kontakte sind und je mehr Geschwindigkeit dabei im Mittel verlorengeht. Präziser ist die Verlustrate das Produkt aus der Anzahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit die Wand treffen, \dot{N}_w , und dem typischen Verlust an mittlerer Axialgeschwindigkeit, der aus solch einem Kontakt resultiert, Δ^-v .

Die Kollisionsrate \dot{N}_w ist dabei proportional zur typischen Radialgeschwindigkeit der Teilchen (also zur thermischen Geschwindigkeit σ), zur Teilchendichte $n = N/LW$ und zur Länge des Wandstücks, L , so daß sich $\dot{N}_w \propto N\sigma/W$ ergibt. Um den typischen Verlust an mittlerer Axialgeschwindigkeit zu berechnen, greifen wir auf die Definition von v zurück und schreiben

$$\Delta^-v = v^f - v^i \quad (4.5)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (v_{y,i}^f - v_{y,i}^i) \quad (4.6)$$

$$= \frac{1}{N} \Delta v_{y,k}, \quad (4.7)$$

wo k die Nummer des Teilchens ist, das mit der Wand kollidiert ist, und $\Delta v_{y,k}$ der typische Verlust an Axialgeschwindigkeit des einzelnen Teilchens. Im letzten Schritt wurde verwendet, daß $v_{y,i}^f = v_{y,i}^i$ für alle $i \neq k$. Da $\Delta v_{y,k}$ proportional zur typischen initialen Axialgeschwindigkeit, also zu v ist, erhalten wir $\Delta^-v \propto v/N$; die zugehörige Proportionalitätskonstante hängt in komplizierter Weise von der Rauigkeit der Wand, vom Normalrestitutionskoeffizienten und Reibungskoeffizienten der Teilchen und nicht zuletzt vom mittleren Aufprallwinkel ab, für den σ/v ein Maß gibt. Wenn alle Vorfaktoren für die Verlustrate pauschal in eine dimensionslose Konstante k_1 eingehen, erhält man für die gesamte Änderungsrate:

$$\frac{d}{dt}v = g - \dot{N}_w \langle \Delta^-v \rangle \quad (4.8)$$

$$= g - k_1 \sigma v W^{-1}. \quad (4.9)$$

4.2.2 Änderungsrate der thermischen Geschwindigkeit

Gewinne an thermischer Geschwindigkeit treten bei Teilchen-Wand-Kontakten auf. Die entsprechende Zuwachsrate ist also gleich der Rate \dot{N}_w mal dem typischen Gewinn an mittlerer thermischer Geschwindigkeit, der aus solch einem Kontakt resultiert, $\Delta^+\sigma$. Zur Berechnung von $\Delta^+\sigma$ greifen wir auf die Definition von σ zurück. Es ist zunächst:

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{1}{N} \sum_i v_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_i \bar{v}_i^i \right)^2 \\ &= \frac{1}{N} \left(\sum_{i \neq k} v_i^2 + v_k^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i \neq k} \bar{v}_i^i + \bar{v}_k^i \right)^2 \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{N} \left(\sum_{i \neq k} v_i^{i^2} + v_k^{i^2} - \frac{1}{N} \left(\sum_{i \neq k} \vec{v}_i^i \right)^2 - \frac{2}{N} \left(\sum_{i \neq k} \vec{v}_i^i \right) \vec{v}_k^i - \frac{1}{N} v_k^{i^2} \right). \quad (4.10)$$

Hierbei ist wieder k die Nummer des kollidierenden Teilchens. Ein analoger Ausdruck ergibt sich für σ^{f^2} , und die Differenz zwischen ihnen lautet unter Berücksichtigung von $\vec{v}_i^f = \vec{v}_i^i$ für alle $i \neq k$

$$\sigma^{f^2} - \sigma^{i^2} = \frac{1}{N} \left(v_k^{f^2} - v_k^{i^2} - \frac{2}{N} \left(\sum_{i \neq k} \vec{v}_i^i \right) (\vec{v}_k^f - \vec{v}_k^i) - \frac{1}{N} (v_k^{f^2} - v_k^{i^2}) \right) \quad (4.11)$$

$$\approx \frac{1}{N} \left(v_k^{f^2} - v_k^{i^2} - \frac{2}{N} \left(\sum_{i \neq k} \vec{v}_i^i \right) \Delta \vec{v}_k \right) \quad (4.12)$$

$$\approx (\Delta v_k)^2 / N. \quad (4.13)$$

Hierbei ist $\Delta \vec{v}_k = \vec{v}_k^f - \vec{v}_k^i$, der letzte Summand von (4.11) wurde vernachlässigt, und der Schluß von (4.12) auf (4.13) ergibt sich durch Berücksichtigung von

$$\begin{aligned} v_k^{f^2} - v_k^{i^2} &= ((\Delta v_k)^2 - v_k^{i^2} + 2\vec{v}_k^i \vec{v}_k^f) - v_k^{i^2} \\ &= (\Delta v_k)^2 + 2\vec{v}_k^i \Delta \vec{v}_k \end{aligned} \quad (4.14)$$

zusammen mit der Annahme, daß das typische \vec{v}_k^i und $\frac{1}{N} \sum_{i \neq k} \vec{v}_i^i$ denselben Wert haben. Von Interesse ist jedoch nicht $\sigma^{f^2} - \sigma^{i^2}$, sondern $\sigma^f - \sigma^i$. Es ist

$$\begin{aligned} \sigma^f - \sigma^i &= \sqrt{\sigma^{i^2} + \sigma^{f^2} - \sigma^{i^2}} - \sigma^i \\ &= \sigma^i \sqrt{1 + \frac{\sigma^{f^2} - \sigma^{i^2}}{\sigma^{i^2}}} - \sigma^i \\ &\approx \frac{\sigma^{f^2} - \sigma^{i^2}}{2\sigma^i} \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\approx \frac{(\Delta \vec{v}_k)^2}{2N\sigma}, \quad (4.16)$$

wobei in (4.15) die Taylorentwicklung $\sqrt{1+x} \approx 1+x/2$ verwendet und in (4.16) σ^i durch σ ersetzt wurde. Die typische Geschwindigkeitsänderung $\Delta \vec{v}_k$ eines einzelnen Teilchens bei Aufprall auf die Wand ist eine komplizierte Funktion der Wandgeometrie und Teilcheneigenschaften. Sie wird sowohl von der mittleren Axialgeschwindigkeit v als auch von der typischen Radialgeschwindigkeit, also von σ abhängen; wir machen hier die Annahme, daß $|\Delta v_k|$ proportional zum geometrischen Mittel von v und σ ist, also $(\Delta v_k)^2 \propto \sigma v$. Daraus ergibt sich nun

$$\Delta^+ \sigma = \sigma^f - \sigma^i \propto v/N. \quad (4.17)$$

Wenden wir uns der Verlustrate für thermische Geschwindigkeit zu. Verluste an thermischer Geschwindigkeit treten bei Kollisionen zwischen freien Teilchen auf; die entsprechende Verlustrate ist also gleich der Anzahl von Teilchen-Teilchen-Stößen pro Zeiteinheit, \dot{N}_g , multipliziert mit dem typischen Verlust $\Delta^- \sigma$, der aus einer solchen Kollision resultiert. Die Kollisionsrate \dot{N}_g ist proportional zur Anzahl der Teilchen N , zur typischen Relativgeschwindigkeit, also zu σ , und umgekehrt proportional zur mittleren freien Weglänge

λ . Es ist also $\dot{N}_g \propto N\sigma/\lambda$. Der mittlere Verlust $\Delta^-\sigma$ ergibt sich wieder aus Gleichung (4.16); $|\Delta v_k|$ ist hier als proportional zur typischen Relativgeschwindigkeit anzusehen, so daß man $\Delta^-\sigma \propto \sigma/N$ erhält. Die zugehörige Proportionalitätskonstante hängt von der Elastizität der Korn-Korn-Stöße ab und hat einen Wert zwischen Null (für perfekt elastische und reibungsfreie Teilchen, $e_n = 1, \mu = 0$) und eins (für perfekt inelastische und rauhe Teilchen, $e_n = 0, \mu \rightarrow \infty$). Wenn alle Vorfaktoren für Gewinnrate und Verlustrate pauschal in dimensionslose Konstanten k_2 und k_3 eingehen, erhält man für die gesamte Änderungsrate:

$$\frac{d}{dt}\sigma = \dot{N}_w\Delta^+\sigma - \dot{N}_g\Delta^-\sigma \quad (4.18)$$

$$= k_2\sigma v W^{-1} - k_3\sigma^2\lambda^{-1}. \quad (4.19)$$

Insgesamt ist die Zeitentwicklung von v und σ durch zwei gekoppelte nichtlineare Differentialgleichungen bestimmt, die in ihrer Form an Ratengleichungen aus der Reaktionskinetik oder aus der Populationsdynamik¹ erinnern:

$$\begin{cases} \dot{v} = g - \frac{k_1}{W} \sigma v \\ \dot{\sigma} = \frac{k_2}{W} \sigma v - \frac{k_3}{\lambda} \sigma^2. \end{cases} \quad (4.9)$$

$$(4.19)$$

Es verbleibt noch, eine Relation zwischen der mittleren freien Weglänge λ und beispielsweise der Packungsdichte η anzugeben. Für verdünnte Systeme läßt sich eine Formel in Analogie zur kinetischen Gastheorie ableiten:

$$\frac{\lambda}{d} = \frac{\sqrt{2}\pi}{8\eta}. \quad (4.20)$$

Für dichtere Systeme ergeben sich wie bei dichten Gasen Korrekturen, die durch Summanden höherer Ordnung in η im Nenner berücksichtigt werden können [236]; im Fall sehr dichter Systeme läßt sich wieder ein einfacher Zusammenhang ableiten [91]:

$$\frac{\lambda}{d} = \sqrt{\eta_c/\eta} - 1, \quad (4.21)$$

wobei η_c die maximal mögliche Packungsdichte darstellt. Bei geringen Packungsdichten kann in erster Näherung Gleichung (4.20) angewendet werden.

¹Zur Illustration sei hier ein Beispiel für ein biologisches System angeführt, das ebenfalls durch Gleichungen der Form von (4.9) und (4.19) beschrieben wird. Betrachtet sei ein abgeschlossenes Stück Dschungel. σ sei die Populationsdichte einer Spezies von Affen, die sich ausschließlich von Kokosnüssen ernährt; v sei die Dichte von Kokosnüssen, die sich an den Bäumen oder auf dem Boden befinden und dort von den Affen gefunden und gefressen werden können. Der Habitat ist im ökologischen Gleichgewicht und die Zahl der Kokosbäume ist zeitlich konstant; ebenso zeitlich konstant ist die Rate g , mit der die Kokosbäume neue Früchte erzeugen (erster Term in Gleichung (4.9)). Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Affe eine Kokosnuß findet und frißt, ist proportional zur Dichte der Affen und zur Dichte der Nüsse (zweiter Term in Gleichung (4.9)). Die Geburtenrate der Affen ist proportional zur Populationsdichte und zur Nahrungsgrundlage (erster Term in Gleichung (4.19)). Die Sterberate der Affen ist proportional zur Populationsdichte und einem Aggressionspotential, das proportional der Dichte der Affen ist und bestimmt, wie häufig sich Affen in blutigen Rankämpfen gegenseitig umbringen (zweiter Term in Gleichung (4.19)).

4.3 Auswertung der Gleichungen

Durch numerische Integration der Gleichungen (4.9) und (4.19) kann die Zeitentwicklung eines Systems von gegebenen Anfangsbedingungen $v^i = v(t_0)$ und $\sigma^i = \sigma(t_0)$ aus berechnet werden. Zuvor sollen jedoch einige Eigenschaften dieses Gleichungssystems ermittelt werden.

4.3.1 Stationäre Zustände, Reduktion

Die stationären Zustände, denen das System zustrebt, lassen sich durch Nullsetzen der linken Seiten in den Gleichungen (4.9) und (4.19) und Auflösen nach v und σ ermitteln:

$$v_s^2 = \frac{k_3}{k_1 k_2} \frac{g W^2}{\lambda} \quad (4.22)$$

$$\sigma_s^2 = \frac{k_2}{k_1 k_3} g \lambda. \quad (4.23)$$

Diese stationären Zustände werden zur Normierung der Variablen v und σ herangezogen. Mit der Definition

$$\tilde{v} := v/v_s \quad (4.24)$$

$$\tilde{\sigma} := \sigma/\sigma_s \quad (4.25)$$

wird aus den Gleichungen (4.9) und (4.19)

$$\frac{d}{dt} \tilde{v} = \frac{g}{v_s} - \frac{k_1 \sigma_s}{W} \tilde{v} \tilde{\sigma} \quad (4.26)$$

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma} = \frac{k_2 v_s}{W} \tilde{v} \tilde{\sigma} - \frac{k_3 \sigma_s}{\lambda} \tilde{\sigma}^2. \quad (4.27)$$

Im stationären Zustand verschwinden die linken Seiten dieser Gleichungen, während \tilde{v} und $\tilde{\sigma}$ den Wert 1 annehmen. Das bedeutet, daß jeweils die beiden konstanten Vorfaktoren g/v_s und $k_1 \sigma_s/W$ sowie $k_2 v_s/W$ und $k_3 \sigma_s/\lambda$ gleich sein müssen.² Sie lassen sich daher ausklammern und das erste Paar wird zusätzlich zur Reskalierung der Zeit benutzt:

$$\tilde{t} := t g / v_s, \quad (4.28)$$

so daß ein reduziertes Gleichungssystem

$$d\tilde{v}/d\tilde{t} = 1 - \tilde{v} \tilde{\sigma} \quad (4.29)$$

$$d\tilde{\sigma}/d\tilde{t} = A \tilde{v} \tilde{\sigma} - A \tilde{\sigma}^2 \quad (4.30)$$

entsteht, in dem der einzige freie Parameter

$$A = \frac{k_2 v_s^2}{g W} = \frac{k_3 W}{k_1 \lambda} \quad (4.31)$$

das Verhalten der Transienten von v und σ bestimmt.

²Diese beiden Gleichungen enthalten aber keine zusätzliche Information; sie ergeben sich unmittelbar aus (4.22) und (4.23).

4.3.2 Stabilität der stationären Zustände

Man untersucht die Stabilität der stationären Zustände $\tilde{v} = 1$ und $\tilde{\sigma} = 1$ durch einen Störungsansatz, d.h. indem man nach der Zeitentwicklung einer kleinen Störung Δv und $\Delta \sigma$ der stationären Zustände fragt. Dazu werden die gestörten Zustände

$$\tilde{v} = 1 + \Delta v \quad (4.32)$$

$$\tilde{\sigma} = 1 + \Delta \sigma \quad (4.33)$$

in die reduzierten Gleichungen (4.29) und (4.30) eingesetzt. Da die Störungen nach Voraussetzung klein gegen 1 sind, werden Terme höherer als erster Ordnung vernachlässigt und man erhält ein lineares Differentialgleichungssystem in Δv und $\Delta \sigma$:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Delta v \\ \Delta \sigma \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & -1 \\ A & -A \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \Delta v \\ \Delta \sigma \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

Die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix \mathbf{M} bestimmen das Stabilitätsverhalten der Störungen Δv und $\Delta \sigma$. Sie ergeben sich aus der charakteristischen Gleichung

$$\det(\mathbf{M} - \lambda \mathbf{E}) = 0 \quad (4.35)$$

zu

$$\lambda_{1/2} = -\frac{A+1}{2} \pm \underbrace{\sqrt{\left(\frac{A+1}{2}\right)^2 - 2A}}_D. \quad (4.36)$$

Da $A > 0$ per Definition, gilt für die Diskriminante $D^2 < (A+1)/2$, so daß der Realteil der Eigenwerte λ stets negativ ist. Da ein lineares Gleichungssystem der Form $\frac{d}{dt}\vec{x} = \mathbf{M}\vec{x}$ Lösungen der Form $\vec{x} = \sum_i a_i \exp(\lambda_i t) \vec{u}_i$ besitzt, wo \vec{u}_i die Eigenvektoren der Matrix \mathbf{M} zu den Eigenwerten λ_i und a_i beliebige Konstanten sind, folgt aus der Negativität der Realteile von $\lambda_{1/2}$, daß die Störungen Δv und $\Delta \sigma$ mit der Zeit zerfallen. Anders ausgedrückt, die stationären Lösungen $\tilde{v} = 1$ und $\tilde{\sigma} = 1$ sind stabil.

Auf der anderen Seite kann es oszillierende Lösungen von $\Delta v(t)$ und $\Delta \sigma(t)$ geben, nämlich genau dann, wenn die Diskriminante D negativ wird, es also einen nichtverschwindenden Imaginärteil der λ gibt. Die Forderung $D < 0$ führt auf die Bedingung $A \in (3 - 2\sqrt{2}, 3 + 2\sqrt{2})$. Wie sich später zeigen wird, ist dies für praktisch vorkommende A meistens erfüllt; die Dämpfungskonstante und die Periode der Oszillationen sind aber so groß, daß diese praktisch nicht zutage treten.

4.3.3 Gültigkeitsbereich

In der Herleitung der Gleichungen sind folgende Annahmen explizit oder implizit verwendet worden:

- Nach Voraussetzung findet alle Scherung nur zwischen der Schicht der Wandteilchen und dem angrenzenden effektiven Medium, das allerdings endliche Breite hat, statt.

- Die Dichte muß niedrig genug sein, daß die Rate der Teilchen-Wand-Kollisionen wirklich durch die thermische Geschwindigkeit σ und nicht, wie bei Bagnolds Herleitung seines Stoffgesetzes (vgl. Abschnitt 1.2.4), durch die Axialgeschwindigkeit v gegeben ist.
- Die Dichte muß hoch genug sein, daß eine Kopplung zwischen x - und y -Komponente der thermischen Geschwindigkeiten gegeben ist. Durch die Bremsungen an der Wand ergibt sich präferentiell eine stärkere Erhöhung der y -Komponente („anisotrope Heizung“), die im Innern des Systems thermalisiert werden muß.
- Teilchendichte η und Rohrbreite W sind derart niedrig und die Teilchen derart elastisch, daß $l_d \gg W$ mit $l_d \propto d/(\eta\sqrt{1-e_n^2})$ (1.2) erfüllt ist, d.h. daß die Bildung einer inelastischen Mikrostruktur unterdrückt ist. Dies setzt eine obere Grenze für ηW .
- Bei der Herleitung der Verlustrate von σ wurde verwendet, daß $\lambda \ll W$ ist. Dies setzt eine untere Grenze für ηW .
- Die Teilchen haben keinen Rotationsfreiheitsgrad. Dies ist gleichbedeutend mit verschwindender Kopplung zwischen translatorischen Freiheitsgraden und Rotationsfreiheitsgrad, also mit verschwindendem Reibungskoeffizienten.
- Wechselwirkung zwischen Teilchen findet nur in Form von binären, unabhängigen Kollisionen statt.

Die Einschränkungen, denen die Theorie unterliegt, scheinen auf den ersten Blick beträchtlich zu sein und ihre strenge Gültigkeit für reale granulare Flüsse, in denen *immer* Scherung und damit Temperaturerzeugung auch weit von der Wand entfernt auftritt, mehr als fraglich. Es zeigt sich jedoch, daß die Verletzung gewisser Annahmen der Theorie für die stationären Zustände bei niedrigen Dichten nur geringe Auswirkungen hat und daß die Transienten sogar noch in relativ dichten Flüssen, wo die Voraussetzungen in krasser Weise verletzt sind, erstaunlich genau vorhergesagt werden.

4.3.4 Erweiterung zu höheren Dichten

Es ist instruktiv zu untersuchen, inwiefern man die einfache Theorie zu höheren Dichten hin erweitern kann. Wie bereits bemerkt, ist bei mitteldichten Systemen die Annahme der Homogenität durch das Auftreten signifikanter Scherraten auch weit von den Wänden entfernt mit Sicherheit verletzt. In diesem Regime muß ein regelrechtes Stoffgesetz formuliert werden, das lokale Spannungen zur lokalen Scherrate $\partial v_y / \partial x$ in Beziehung setzt. Dies soll im folgenden in Anlehnung an die Argumentationen von Abschnitt 4.2 versucht werden.

Moderate Dichten

Betrachtet seien zwei „Schichten“ des granularen Materials, die um den Teilchendurchmesser d voneinander entfernt sind. Die lokale Relativ-Schergeschwindigkeit hat dann den Wert $d\partial v_y / \partial x$. Die Scherspannungskomponente τ_{xy} zwischen den beiden Schichten läßt

sich unter der Annahme, daß nur Kollisionen für den Impulsstrom sorgen, darstellen als

$$\tau_{xy} \propto \dot{n}_g \cdot \Delta p_{xy}. \quad (4.37)$$

Die „Kollisionsstromdichte“ \dot{n}_g ist dabei proportional zur typischen Relativgeschwindigkeit σ und zur Teilchenzahldichte n :

$$\dot{n}_g \propto \sigma n \propto \frac{\sigma N}{LW} \propto \sigma \eta d^{-2}.$$

Der typische Impulsübertrag pro Kollision Δp_{xy} ist proportional zur typischen Teilchenmasse m und zur Relativgeschwindigkeit $d\partial v_y/\partial x$, so daß sich

$$\tau_{xy} \propto \sigma \eta m d^{-1} \partial v_y / \partial x \quad (4.38)$$

ergibt. Die hier auftauchende thermische Geschwindigkeit σ läßt sich wie in Abschnitt 4.2.2 bilanzieren: Die Verlustrate ist wie dort proportional zu σ^2/λ . Die Zuwachsrates ergibt sich aus dem Produkt von Kollisionsrate ($\propto \sigma/\lambda$) und typischem Gewinn an thermischer Geschwindigkeit pro Kollision ($\propto d\partial v_y/\partial x$), ist also proportional zu $\sigma \lambda^{-1} d\partial v_y/\partial x$. Im stationären Zustand müssen Gewinn- und Verlustrate gleich sein, so daß sich

$$\sigma \propto d\partial v_y / \partial x \quad (4.39)$$

ergibt. Einsetzen in (4.38) liefert:

$$\tau_{xy} \propto \eta m \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2. \quad (4.40)$$

Dies aber ist gerade das Bagnoldsche Stoffgesetz, dessen Gültigkeit damit auch für Flüsse, in denen die thermische Geschwindigkeit eine große Rolle spielt, nachgewiesen ist.

Im stationären Zustand der Scherströmung muß die Divergenz des Spannungstensors, also die innere Reibung, die äußeren Kräfte und Körperkräfte ausgleichen. Im vorliegenden Fall führt dies auf die Bedingung

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = mgn \propto m g \eta d^{-2}. \quad (4.41)$$

Um aus diesem differentiellen Gleichgewicht explizite Aussagen über die Abhängigkeit der mittleren Axialgeschwindigkeit von W und η zu erhalten, muß über (4.40), in (4.41) eingesetzt, integriert werden. Unter der Annahme konstanter Scherrate $\partial v_y/\partial x$ und verschwindender Fließgeschwindigkeit an der Wand ergibt sich

$$\eta m \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 \propto m g \eta d^{-2} W \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial x} \propto \sqrt{g d^{-2} W} \quad (4.43)$$

$$v_s \propto \sqrt{g d^{-2} W^{3/2}}. \quad (4.44)$$

In gleicher Weise ergibt sich aus Integration über (4.39) die folgende Abhängigkeit für σ_s :

$$\sigma_s \propto \sqrt{g W}. \quad (4.45)$$

Hohe Dichten

Bei hohen Dichten ist es plausibel anzunehmen, daß zum einen die Annahme der Homogenität wieder besser erfüllt ist, daß also nur Scherung an der Wand stattfindet, daß die Häufigkeit der Teilchen-Wand-Kollisionen auf der anderen Seite aber nicht mehr durch die thermische Geschwindigkeit gegeben ist wie in Abschnitt 4.2, sondern wegen der geometrischen Zwänge durch die Fließgeschwindigkeit selbst. Die Bilanzierung der mittleren Axialgeschwindigkeit fordert, daß im stationären Zustand die Zuwachsrate g gleich der Verlustrate $\dot{N}_w \langle \Delta^- v \rangle$ sein muß. Die Kollisionsrate \dot{N}_w ist nun proportional zur typischen Axialgeschwindigkeit v , zur Teilchendichte $n = N/LW$ und zur Länge des Wandstücks L , so daß sich $\dot{N}_w \propto Nv/W$ ergibt. Der typische Geschwindigkeitsverlust $\langle \Delta^- v \rangle$ ist wie in Abschnitt 4.2 proportional zu v/N . Es ist also

$$g \propto v_s^2/W \quad (4.46)$$

$$v_s \propto \sqrt{gW}. \quad (4.47)$$

Über die thermische Geschwindigkeit ergibt sich hier keine Aussage, da sie nach Voraussetzung für das Fließverhalten keine Rolle spielt.

4.3.5 Diskussion

In Abhängigkeit von der Packungsdichte lassen sich vier verschiedene Regimes unterscheiden:

- Das Einteilchen-Regime („Knudsen-Regime“), in dem die mittlere freie Weglänge λ der Teilchen größer als die Rohrbreite W ist, so daß die Teilchen voneinander praktisch nichts spüren. Dieses Regime konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht ausführlich behandelt werden; klar ist allerdings, daß der stationäre Zustand der Axialgeschwindigkeit relativ hoch liegt und durch starke Fluktuationen gekennzeichnet ist (s. Abschnitt 4.5.1, insbesondere Abb. 4.9 auf S. 81).
- Das verdünnte Regime, in dem die Annahmen der einfachen Theorie gut erfüllt sind. In diesem Fall wird für den stationären Zustand der Axialgeschwindigkeit eine Abhängigkeit $v_s \propto \sqrt{g\eta} W$ vorausgesagt und für den stationären Zustand der thermischen Geschwindigkeit $\sigma_s \propto \sqrt{g/\eta}$. Darüber hinaus lassen sich die Transienten dieser Größen durch numerische Integration zweier einfacher gekoppelter Differentialgleichungen ermitteln.
- Das scherende Regime („Bagnold-Regime“), in dem sich bereits eine deutliche radiale Struktur zeigt, die zu einer Erzeugung von thermischer Geschwindigkeit auch weit von der Wand entfernt führt. In diesem Fall lauten die Voraussagen für die stationären Zustände der axialen und thermischen Geschwindigkeit $v_s \propto \sqrt{g/d^2} W^{3/2}$ bzw. $\sigma_s \propto \sqrt{gW}$.
- Das dichte Regime („Hagen-Regime“ nach dem Pionier der Beschreibung des Fließverhaltens dichter granularer Materie), in dem sich aufgrund geometrischer Zwänge wieder weitgehend homogene Verhältnisse einstellen, und wo die thermische Geschwindigkeit für die Wandkollisionsraten keine Rolle mehr spielt. In diesem Fall

ergibt sich für den stationären Zustand der Axialgeschwindigkeit die Voraussage $v_s \propto \sqrt{gW}$.

Es ist natürlich zu erwarten, daß die Regimes kontinuierlich ineinander übergehen, so daß man nicht auf eine strenge Gültigkeit der abgeleiteten Gesetzmäßigkeiten hoffen kann. In den folgenden Abschnitten soll überprüft werden, inwiefern die Gesetzmäßigkeiten des verdünnten und des Bagnold'schen Regimes in simulierten granularen Flüssen wirklich erfüllt sind. Zunächst sollen jedoch die vorausgesagten Transienten mit Simulationen verglichen werden.

4.4 Transienten

4.4.1 Anpassung der freien Parameter

Um einen quantitativen Vergleich der Theorie mit Simulationen zu erlauben, müssen die drei unbekannten Konstanten k_1 , k_2 , k_3 bestimmt werden. Zwei Bestimmungsgleichungen ergeben sich aus den Gleichungen (4.22) und (4.23), wenn die Werte v_s und σ_s in einer Simulation gemessen werden sowie W und λ bekannt sind:

$$\frac{k_3}{k_1 k_2} = c_1 = \frac{v_s^2 \lambda}{g W^2} \quad (4.48)$$

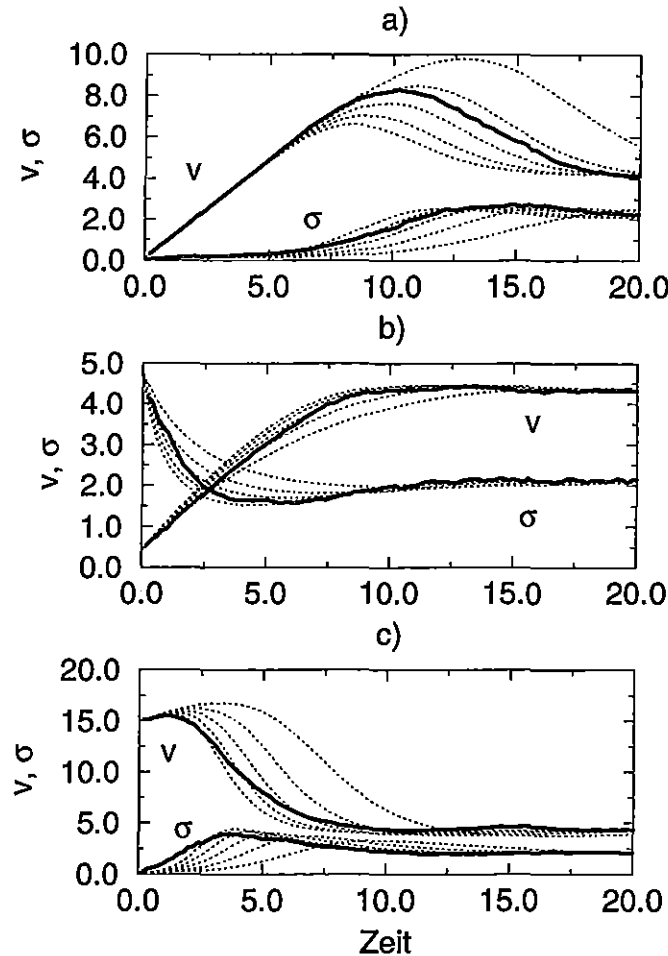
$$\frac{k_2}{k_1 k_3} = c_2 = \frac{\sigma_s^2}{g \lambda}. \quad (4.49)$$

Eine der Konstanten kann frei gewählt werden; sie bestimmt die Größe A aus dem vorigen Abschnitt und somit das Relaxationsverhalten des Systems. Wenn, wie in der expliziten Form von A , k_2 der frei wählbare Parameter sein soll, ergibt sich für die anderen Konstanten:

$$k_1 = \sqrt{1/c_1 c_2} = \frac{g W}{v_s \sigma_s} \quad (4.50)$$

$$k_3 = \sqrt{c_1/c_2} k_2 = \frac{v_s \lambda}{\sigma_s W} k_2. \quad (4.51)$$

In Abb. 4.2 sind die Zeitentwicklungen von v und σ , wie sie sich aus ED-Simulationen mit verschiedenen Anfangsbedingungen, aber sonst gleichen Parametern ergeben, mit fetten durchgezogenen Linien dargestellt (es wurde hier, um die natürlichen Fluktuationen zu unterdrücken, über 100 unabhängige Läufe gemittelt). Die Parameter der Simulation waren: $W = 6$, $\eta = 0.15$, $e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$, $e_s = 0$. Hier und in allen folgenden Simulationen ist, wenn nicht explizit anders vermerkt, das Seitenverhältnis L/W zu $3/2$ gewählt; hier war also $L = 9$. Unter Verwendung von (4.20) ergibt sich eine mittlere freie Weglänge von $\lambda = 3.70$. Die gemessenen Werte von v und σ im stationären Zustand sind $v_s \approx 4.3$ und $\sigma_s \approx 2.1$; daraus ergibt sich $k_1 = 0.66$ und $k_3 = 1.26 k_2$. Die gestrichelten Linien in Abb. 4.2 sind nun durch Iteration der Gleichungen (4.9) und (4.19) zu jeweils gleichen Anfangsbedingungen wie in der Simulation und mit verschiedenen Werten k_2 erzeugt.



Abbildungung 4.2: Einfluß des Parameters k_2 auf die Transienten für verschiedene Anfangsbedingungen in einem Rohr der Breite $W = 6$. k_2 variiert von 0.2 bis 0.6 in Schritten von 0.1 (gestrichelte Linien); der kleinste Wert von k_2 entspricht den Kurven mit der größten charakteristischen Zeit. Fette durchgezogene Linien: ED-Simulationen, gemittelt über 100 unabhängige Läufe.

- In Abb. 4.2a lauten die Anfangsbedingungen $v^i = 0.1$ und $\sigma^i = 0.1$. Zu Beginn ist die mittlere thermische Geschwindigkeit σ fast Null, so daß es gemäß Gleichung (4.29) nur geringe Bremsung für die mittlere Axialgeschwindigkeit v gibt – das granulare Material beschleunigt praktisch im freien Fall. Je schneller das System wird, umso stärker wächst σ an; die zugehörige Wachstumskonstante ist nach (4.30) und (4.31) proportional zu k_2 . Mit steigendem σ wächst die bremsende Kraft, so daß v durch ein Maximum geht und zu sinken beginnt. Unterdessen wächst σ noch weiter, erreicht ein Maximum, und sowohl v als auch σ nähern sich von oben an ihren stationären Zustand an.
- In Abb. 4.2b lauten die Anfangsbedingungen $v^i = 0.4$ und $\sigma^i = 4.8$. Die thermische Geschwindigkeit σ zerfällt schnell unter dem Einfluß des zweiten Terms in Gleichung (4.19); da gleichzeitig v ansteigt, und somit der erste Term in Gleichung (4.19)

gestärkt wird, ergibt sich ein Minimum in σ .

- In Abb. 4.2c lauten die Anfangsbedingungen $v^i = 15.0$ und $\sigma^i = 0.1$. Hier kann v zu Beginn noch steigen, da es noch keine signifikante Bremsung durch σ gibt; σ steigt jedoch mit der Zeit stark an, so daß v durch ein Maximum geht und zu sinken beginnt, wodurch sich letztlich eine Situation ähnlich wie in Abb. 4.2a ergibt.

In allen drei Fällen wird das in den Simulationen beobachtete Transientenverhalten sehr gut durch die Gleichungen (4.9) und (4.19) beschrieben. Bis auf die in Abb. 4.2c verwendeten Anfangsbedingungen gibt $k_2 \approx 0.4$ die beste Approximation. Sieht man diesen Wert als gültig an, ergibt sich für die Konstanten: $k_1 = 0.66$, $k_2 = 0.40$, $k_3 = 0.50$.

Wenn die Gleichungen (4.9) und (4.19) streng erfüllt wären, sollten die an *einem* speziellen System bestimmten Parameter k_1 , k_2 und k_3 für *alle* anderen Systeme aus dem Gültigkeitsbereich der Gleichungen unverändert gelten, und im Sinne der Reduktion der beschreibenden Gleichungen (Abschnitt 4.3.1) stünde das Transientenverhalten des speziellen Systems stellvertretend für alle anderen Systeme mit den gleichen Anfangsbedingungen v^i/v_s , σ^i/σ_s . Diese Forderung wird jedoch dem approximativen Charakter der Theorie nicht gerecht; insbesondere die Konstanten k_1 und k_2 sind ja stark vereinfachte Größen, die eine in Wirklichkeit sehr komplexe Physik verbergen (so wurde zum Beispiel in der Herleitung die Tatsache erwähnt, daß k_1 und k_2 vom mittleren Aufprallwinkel auf die Wand, also von σ/v abhängen; in der weiteren Auswertung wurde jedoch der Einfachheit halber davon ausgegangen, daß diese Abhängigkeit vernachlässigt werden kann). Um zu untersuchen, in welchem Maße sich die Parameter k_1 , k_2 und k_3 für unterschiedliche Systeme ändern, seien exemplarisch ein System mit größerer Rohrbreite und eines mit größerer Dichte untersucht.

In Abb. 4.3 sind Transienten aus einem System dargestellt, das von dem zuerst untersuchten nur durch seine größere Rohrbreite $W = 10$ abweicht. Die gemessenen Geschwindigkeiten im stationären Zustand sind hier $v_s \approx 7.1$ und $\sigma_s \approx 2.7$, so daß sich $k_1 = 0.52$ und $k_3 = 0.97 k_2$ ergibt. Die Anfangsbedingungen sind ähnlich wie in Abb. 4.2. Mit Ausnahme von den in Abb. 4.3a verwendeten Anfangsbedingungen wird das in Simulationen beobachtete Systemverhalten gut durch $k_2 \approx 0.5$ approximiert. Nimmt man diesen Wert als den gültigen an, ergibt sich: $k_1 = 0.52$, $k_2 = 0.50$, $k_3 = 0.49$. Die Werte der Parameter haben sich also geringfügig gegenüber denen des schmalen Systems verändert.

In Abb. 4.4 sind Transienten aus einem System dargestellt, das sich von dem oben untersuchten nur durch seine größere Teilchendichte $\eta = 0.45$ unterscheidet. Die gemessenen Geschwindigkeiten im stationären Zustand sind hier $v_s \approx 4.2$ und $\sigma_s \approx 1.25$, so daß unter Berücksichtigung von $\lambda \approx 1.23$ gemäß Gleichung (4.20) $k_1 = 1.14$ und $k_3 = 0.69 k_2$ wird. Die Anfangsbedingungen sind wieder ähnlich wie in Abb. 4.2. Das in Simulationen beobachtete Systemverhalten wird gut durch $k_2 \approx 1.4$ approximiert. Insgesamt ergibt sich für die Parameter: $k_1 = 1.14$, $k_2 = 1.4$, $k_3 = 0.97$. Dies ist eine wesentliche Änderung gegenüber den entsprechenden Werten des ursprünglichen Systems $W = 6$, $\eta = 0.15$. Es wird sich später zeigen, daß bei einer Dichte von $\eta = 0.45$ die Voraussetzungen der Theorie in krasser Form verletzt sind; so liefert die Theorie keine gute Voraussage für die stationären Zustände und ihre funktionellen Abhängigkeiten mehr. Durch die Anpassung der k_i läßt sich nichtsdestoweniger eine sehr gute Beschreibung des Transientenverhaltens erreichen.

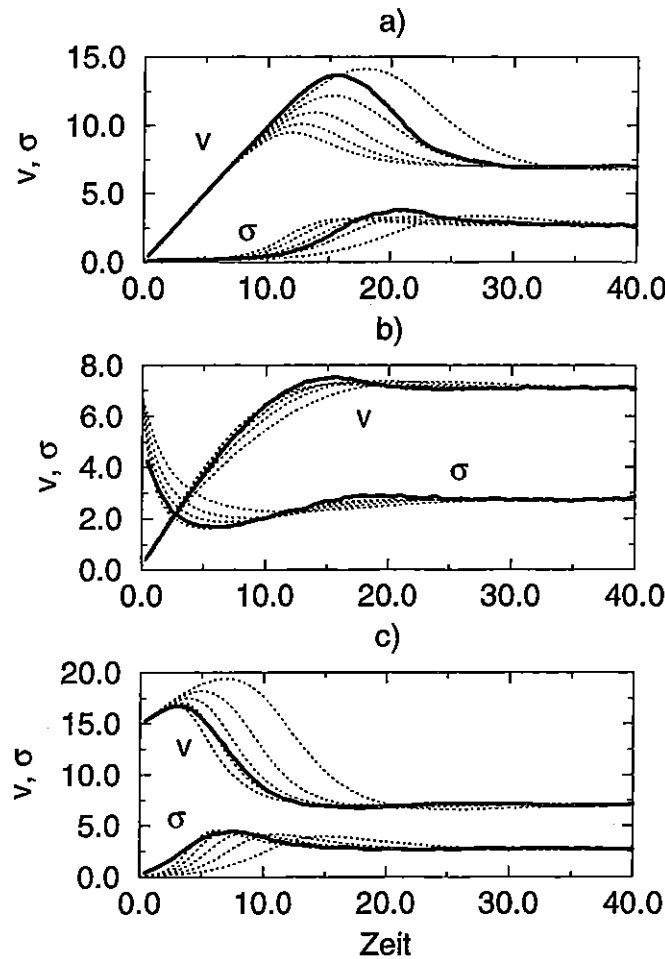


Abbildung 4.3: Analogon zu Abb. 4.2 für ein Rohr der Breite $W = 10$. k_2 variiert von 0.2 bis 0.6 in Schritten von 0.1. Anfangsbedingungen waren: a) $v^i = 0.1$, $\sigma^i = 0.1$; b) $v^i = 0.1$, $\sigma^i = 7.0$; c) $v^i = 15.0$, $\sigma^i = 0.1$.

4.4.2 Oszillatorische Relaxation und Fluktuationen

In Abschnitt 4.3.2 ergab sich, daß kleine Störungen der stationären Zustände möglicherweise oszillierend verschwinden. Nach der Anpassung des Parameters k_2 an „reale“ (d.h. simulierte) Systeme lassen sich die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix M , die den Zerfall kleiner Störungen beschreiben, bestimmen.

Setzt man die zum oben diskutierten Fall $W = 6$ gehörigen Werte zusammen mit $k_2 \approx 0.4$ in Gleichung (4.31) und (4.36) ein, so ergibt sich $A \approx 1.23$ und damit $\lambda_{1/2} \approx -1.11 \pm i \cdot 1.10$. Die zum Fall $W = 10$ gehörigen Werte zusammen mit $k_2 \approx 0.5$ ergeben $A \approx 2.52$ und damit $\lambda_{1/2} \approx -1.76 \pm i \cdot 1.39$. Das bedeutet, daß kleine Störungen der stationären Zustände in gedämpften Oszillationen zerfallen. Die Oszillationen sind in Iterationen tatsächlich zu beobachten; sie sind aber so stark gedämpft, daß sie keinerlei praktische Bedeutung haben.³

³Um Oszillationen bedeutender zu machen, müßte sowohl ihre Dämpfungskonstante $\Re(\lambda)$ als auch ihre

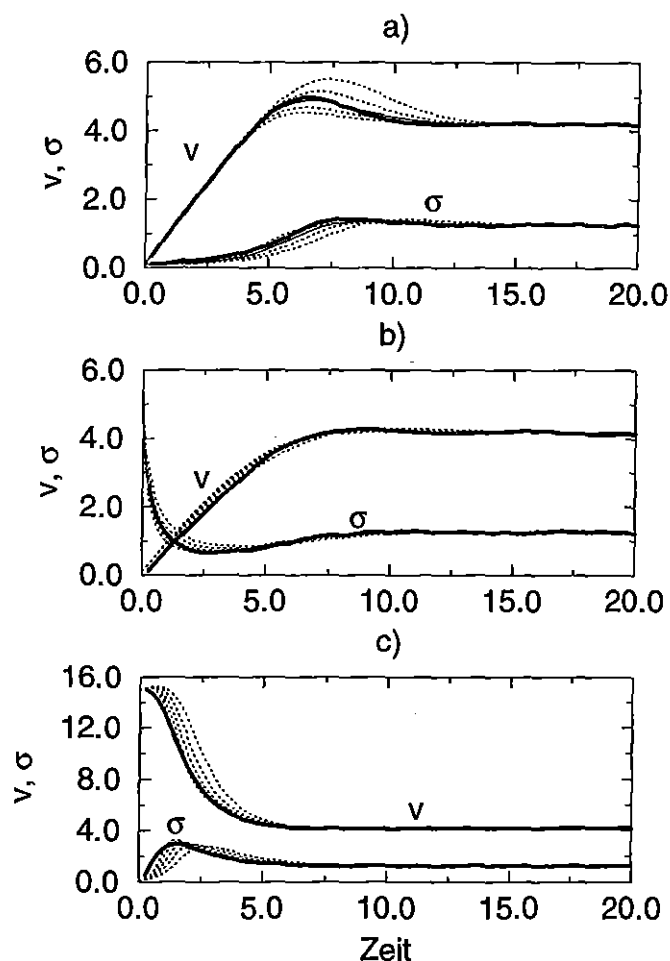


Abbildung 4.4: Analogon zu Abb. 4.2 für ein System der Dichte $\eta = 0.45$. k_2 variiert von 0.8 bis 1.6 in Schritten von 0.2. Anfangsbedingungen waren: a) $v^i = 0.1$, $\sigma^i = 0.1$; b) $v^i = 0.1$, $\sigma^i = 5.0$; c) $v^i = 15.0$, $\sigma^i = 0.1$.

Bei den einzelnen Simulationen gibt es im stationären Zustand ohnehin Fluktuationen, in denen Oszillationen, wie sie sich aus den Gleichungen für das mittlere Systemverhalten ermitteln lassen, gänzlich untergehen. Um einen Eindruck von der Größenordnung dieser natürlichen Fluktuationen zu geben, zeigt Abb. 4.5 eine Einzelsimulation im breiteren Rohr $W = 10$, die mit den Anfangsbedingungen $v^i = v_s$ und $\sigma^i = \sigma_s$ gestartet wurde (durchgezogene Linie). Die Standardabweichung von v ist von der Größenordnung 0.4, diejenige von σ beträgt etwa 0.3. Gestrichelt eingetragen ist das Relaxationsverhalten, wie es von den Gleichungen (4.9) und (4.19) für die Anfangsbedingung $v^i = v_s + 0.4$, $\sigma^i = \sigma_s - 0.3$ (also einen von der Größenordnung der jeweiligen Standardabweichung gestörten Zustand) vorhergesagt wird. Offensichtlich sind die natürlichen Fluktuationen zu groß, um in einer Simulation die theoretisch vorhergesagten Oszillationen zu sehen.

Frequenz $\Im(\lambda)$ kleiner werden.

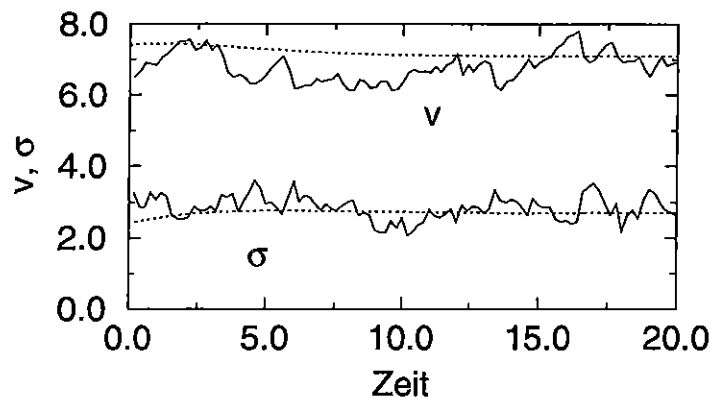


Abbildung 4.5: *Natürliche Fluktuationen um den stationären Zustand (durchgezogene Linien) im Vergleich mit dem Relaxationsverhalten der Gleichungen (gestrichelte Linien)*

4.4.3 Abweichungen vom mittleren Systemverhalten

Die hier vorgestellte Theorie geht von einem mittleren Systemverhalten aus. Einzelne Realisierungen der in den Abbildungen 4.2 und 4.3 gezeigten Simulationen können dagegen unter Umständen bedeutend von dem vorausgesagten mittleren Verhalten abweichen; dies gilt umso mehr, je weniger Teilchen das System enthält, d.h. je weniger Gelegenheit jede Einzelrealisierung des Systems intern zum Ausgleichen von Abweichungen hat. Um die Streubreite des Verhaltens einzelner Realisierungen des gleichen Systems abzuschätzen, wird in Abb. 4.7 das aus 100 Einzelläufen erhaltene mittlere Systemverhalten von Abb. 4.2 zusammen mit jeweils zwei Kurven gezeigt, die die Standardabweichung der Einzelläufe von dem mittleren Verhalten angeben. Offensichtlich sind letztere beträchtlich, so daß auch die Bestimmung der k_2 , wie sie oben vorgenommen wurde, noch eine zusätzliche Unsicherheit erhält. Die Beobachtung, daß in Abb. 4.2c das mittlere σ in den ersten Momenten praktisch linear anwächst, während die Theorie ein deutlich überlineares Anwachsen vorhersagt, findet nun eine natürliche Erklärung darin, daß die simulierte σ -Kurve auch über verschiedene Zeiten mittelt, zu denen das Maximum in σ erreicht ist – in den Einzelsimulationen sieht man durchaus einen recht plötzlichen Anstieg von σ , der von Simulation zu Simulation zu unterschiedlichen Zeitpunkten erfolgt. Erst beim Mitteln über 100 Einzelläufe ergibt sich ein nahezu linearer Anstieg.

Wie stark einzelne Läufe von dem mittleren Verhalten abweichen können, sieht man in Abb. 4.7c, wo sich zur Zeit $t \approx 17$ die Standardabweichung um das mittlere v unvermittelt verschmälert, während sich die um das mittlere σ zur gleichen Zeit verbreitert. Die Schuld an dieser Erscheinung trägt ein einziger Einzellauf, der bis zu dieser Zeit ungebremst beschleunigt und dann sehr plötzlich einen starken Anstieg in σ und demzufolge einen starken Abfall in v erlebt (Abb. 4.6).

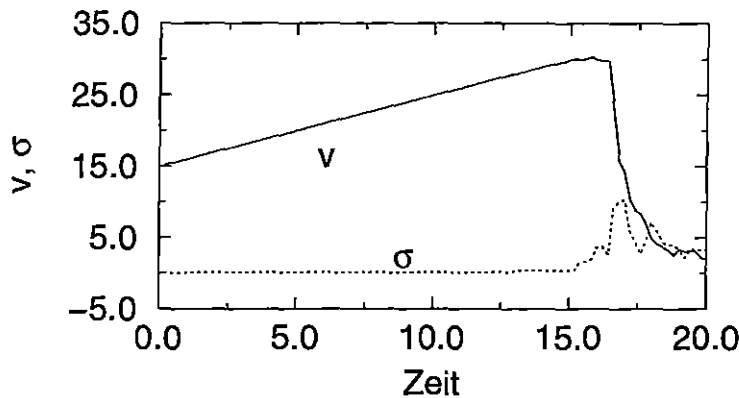


Abbildung 4.6: *Natürliche Abweichungen einzelner Simulationen vom mittleren Verhalten; hier: Eine Einzelsimulation, die mit den Anfangsbedingungen von Abb. 4.2c bzw. Abb. 4.7c gelaufen ist.*

4.5 Stationäre Zustände

Die Gleichungen, die sich aufgrund der Ratengleichungen für die stationären Zustände von v und σ ergeben, lauteten:

$$v_s^2 = \frac{k_3}{k_1 k_2} \frac{g W^2}{\lambda} \quad (4.22)$$

$$\sigma_s^2 = \frac{k_2}{k_1 k_3} g \lambda \quad (4.23)$$

oder unter Verwendung von $\eta \propto d/\lambda$ (4.20):

$$v_s \propto \sqrt{g \eta} W \quad (4.52)$$

$$\sigma_s \propto \sqrt{g/\eta}. \quad (4.53)$$

Zunächst soll gezeigt werden, welche Aussagen sich ausgehend von diesen Gleichungen über das Verhalten des homogenen verdünnten granularen Flusses treffen lassen. Anschließend wird anhand von Simulationen überprüft, inwiefern diese Voraussagen zutreffen, und wo sie ihre Gültigkeit verlieren. In diesem Abschnitt ist, wenn von einer Flußvariablen die Rede ist, stets ihr Wert im stationären Zustand gemeint.

- Sowohl v_s als auch σ_s sind proportional zu \sqrt{g} , der Wurzel der Gravitationsbeschleunigung. Dies ist eine Folge der Tatsache, daß allein die Gravitation das System antreibt; ohne sie käme der Fluß völlig zum Erliegen. Auch im Bagnoldschen und im Hagenschen Regime findet sich diese \sqrt{g} -Abhängigkeit (s. Abschnitt 4.3.4).
- Die mittlere Axialgeschwindigkeit v_s ist proportional zur Rohrbreite W und zu $\sqrt{\eta}$. Im Bagnoldschen Regime gilt dagegen $v_s \propto W^{3/2}$ und es gibt keine η -Abhängigkeit. Es ist zu erwarten, daß sich im granularen Rohrfluß beide Regimes beobachten lassen, mit einem Übergang dazwischen.

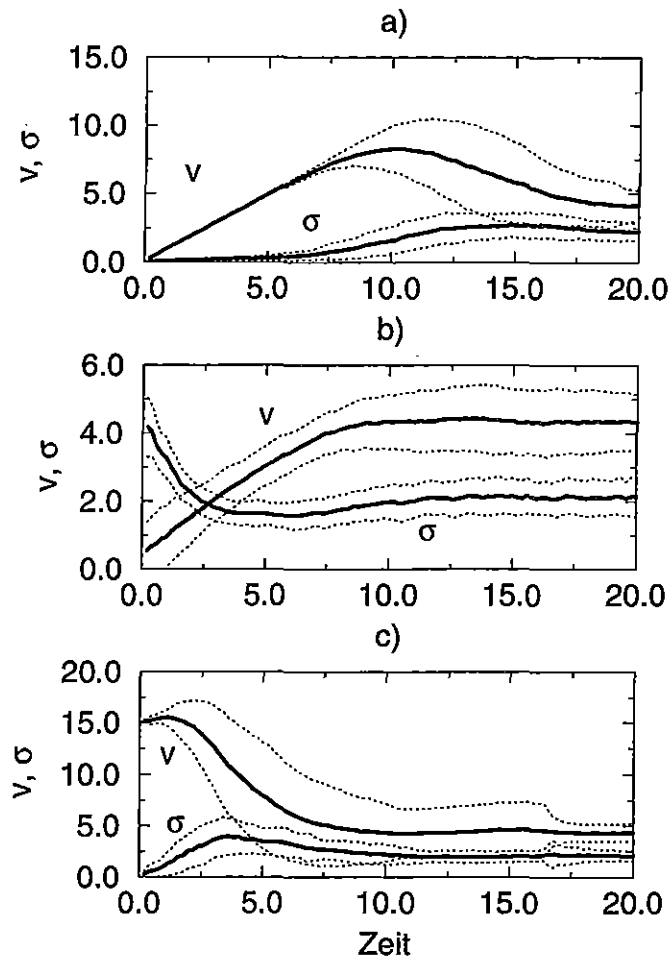


Abbildung 4.7: Natürliche Abweichungen einzelner Simulationen vom mittleren Verhalten; gleiches System wie in Abb. 4.2. Durchgezogene Linien: v und σ über 100 Einzelsimulationen gemittelt. Gestrichelte Linien: Standardabweichungen der Einzelverhalten vom mittleren Verhalten.

- Die thermische Geschwindigkeit σ_s nimmt wie $\eta^{-1/2}$ ab⁴ und ist nicht von W abhängig, während im Bagnold'schen Regime $\sigma_s \propto \sqrt{W}$ gelten sollte und keine η -Abhängigkeit vorausgesagt wird. Auch hier sollten sich beide Regimes mit einem entsprechenden Übergang finden lassen.
- Je inelastischer die Teilchen, d.h. je geringer e_n und je größer μ , desto größer wird k_3 . Daraus folgt, daß mit steigender Teilcheninelastizität die Axialgeschwindigkeit zunimmt und die thermische Geschwindigkeit abnimmt. Andererseits muß für perfekt elastische und glatte Teilchen $k_3 = 0$ sein, so daß in diesem Fall die Axialgeschwindigkeit gegen Null geht, während die thermische Geschwindigkeit divergiert. Auch

⁴Diese Abhängigkeit im verdünnten Regime widerspricht zunächst der Intuition, läßt sich aber wie folgt verstehen: Je höher die Packungsdichte, umso effizienter die dissipative Kühlung, und umso geringer die thermische Geschwindigkeit. Daraus folgt dann auch eine verminderte Bremsung an der Wand, und eine erhöhte Axialgeschwindigkeit.

dieses auf den ersten Blick eigenartige Resultat findet seine Erklärung im Mechanismus der dissipativen Kühlung.

- Der Reibungskoeffizient μ spielt auch für die Parameter k_1 und k_2 eine Rolle. Beide werden durch wachsendes μ erhöht, so daß die Axialgeschwindigkeit mit steigendem μ sinkt. Zusammen mit dem Einfluß, den μ auf k_3 hat, ergibt sich also eine duale Rolle für den Reibungskoeffizienten, deren Nettoeffekt auf die Axialgeschwindigkeit nicht vorherzusagen ist. Der Effekt auf die thermische Geschwindigkeit sollte, da diese wie k_2/k_1 geht, im wesentlichen zu vernachlässigen sein.
- Die Rauigkeit der Wand wirkt sich auf die Parameter k_1 und k_2 aus. Je rauher die Wand, also beispielsweise je größer die Wandteilchen oder je größer der Abstand zwischen ihnen, desto größer k_1 und k_2 , und desto geringer die Axialgeschwindigkeit. Der Einfluß auf die thermische Geschwindigkeit sollte wieder in erster Ordnung zu vernachlässigen sein.
- Der Einfluß einer elektrostatischen Aufladung der Teilchen, wiewohl hier nicht weiter verfolgt,⁵ läßt sich ebenfalls abschätzen. Sind alle Teilchen gleichnamig geladen, so werden durch die resultierende repulsive Kraft einige Teilchen vor Kollisionen bewahrt, so daß die Rate der Kollisionen und damit k_3 herabgesetzt wird. Diejenigen Teilchen, die trotz der Abstoßung kollidieren, speichern Teile ihrer initialen Relativbewegungsenergie im zwischen ihnen aufgebauten elektrischen Feld; diese Energie kann nicht durch die Kollision verlorengehen, so daß der Restitutionskoeffizient effektiv erhöht ist, bzw. k_3 effektiv verringert. Insgesamt ergibt sich für gleichnamig geladene Teilchen eine Verringerung der Axialgeschwindigkeit und Erhöhung der thermischen Geschwindigkeit gegenüber dem ungeladenen Fall. Sind dagegen die Teilchen ungleichnamig geladen, so finden sie sich aufgrund der attraktiven Wechselwirkung zu Paaren ungleichnamiger Ladung zusammen: Effektive Teilchen, die durch Dipolfelder wechselwirken. Durch die resultierende schwache Anziehung der effektiven Teilchen untereinander ist die Wandkollisionsrate herabgesetzt, so daß sich gegenüber dem ungeladenen Zustand erhöhte Axialgeschwindigkeit und erniedrigte thermische Geschwindigkeit ergibt.

Die meisten dieser Überlegungen sollten zumindest von ihrer Tendenz her auch in Flüssen, die die Kriterien der homogenen Theorie nicht streng erfüllen, richtig bleiben. Zunächst soll die Richtigkeit der Vorhersagen jedoch im genuinen Gültigkeitsbereich der homogenen Theorie überprüft werden. Hierzu dienen ED-Simulationen eines Beispielsystems mit $e_n = 0.9$ und $\mu = 0$ für verschiedene Rohrbreiten W und Packungsdichten η (bei diesen Parameterwerten gibt es keine starke Tendenz zum Ausbilden von Mikrostruktur, und der rotatorische Freiheitsgrad ist von den translatorischen entkoppelt). Die stationären Geschwindigkeiten v_s und σ_s ergeben sich durch Zeitmittelung über $v(t)$ und $\sigma(t)$ im stationären Zustand. Die Simulationsdauer war $150 \sqrt{d/g}$; stationäre Zustände wurden typischerweise nach einer Zeit von $20 \sqrt{d/g}$ erreicht (vgl. die Transienten des vorigen Abschnitts). Zur Mittelwertbildung wurden 100 äquidistant im Zeitintervall $[51,150]$ verteilte Werte $v(t_i)$ herangezogen.

⁵Einige Simulationen geladener Systeme wurden im Rahmen dieser Arbeit zwar vorgenommen, aber angesichts der vielen unverständenen Facetten schon des ungeladenen Flusses konnte das Thema nicht vertieft werden. Die Simulationen bestätigten immerhin das hier vorausgesagte Verhalten geladener Systeme.

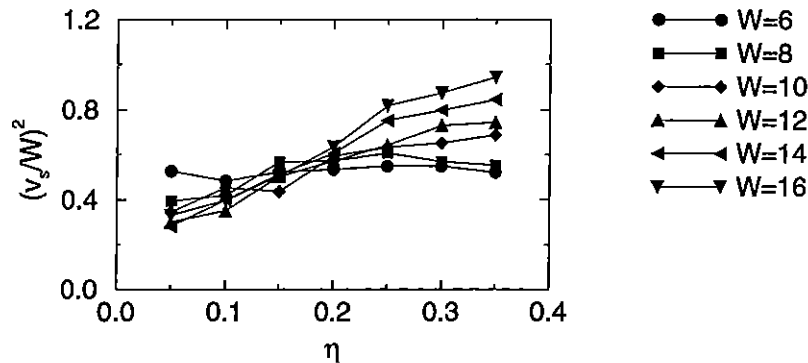


Abbildung 4.8: v_s als Funktion der Rohrbreite W und Packungsdichte η . Durch ED-Simulationen ermittelt an einem System mit $e_n = 0.9$, $\mu = 0$.

4.5.1 v_s als Funktion von W und η

In Abb. 4.8 ist $(v_s/W)^2$ für verschiedene W gegen die Packungsdichte η aufgetragen. Gemäß (4.22) und (4.20) sollte eine solche Darstellung zu einem Kollaps der Datenpunkte auf eine gerade Linie führen. Dies ist in der Tat für $\eta \in [0.05, 0.20]$ sehr gut erfüllt. Für das Wertepaar $(\eta = 0.05, W = 6)$ ergibt sich eine kleine Abweichung, und Simulationen mit $\eta > 0.20$ beginnen, eine andere W -Abhängigkeit als die von der Theorie vorausgesagte aufzuweisen. Diese abweichenden Resultate lassen sich auf Verletzungen von Grundannahmen der Theorie zurückführen:

- Im Falle des Wertepaars $(\eta = 0.05, W = 6)$ ist die Bedingung $\lambda \ll W$ (s. Abschnitt 4.3.3) offenbar so deutlich verletzt, daß sich das System bereits so zu verhalten beginnt, als ob die Teilchen nichts voneinander spürten. Tatsächlich befanden sich bei dieser Simulation nur $N = 4$ Teilchen in der Rechenzelle; Teilchen-Teilchen-Kollisionen sind dann derart selten, daß instantane Thermalisierung der thermischen Geschwindigkeiten nicht mehr ausreichend gewährleistet ist und die thermischen Geschwindigkeiten in axialer und in radialer Richtung zu entkoppeln beginnen. Zur Illustration sei das Schicksal eines einzigen Teilchens in der Rechenzelle betrachtet: Da hier keinerlei Thermalisierung durch Teilchen-Teilchen-Kollisionen mehr erfolgen kann, sind zum einen die Fluktuationen in den Teilchengeschwindigkeiten sehr hoch, zum anderen führt eine starke Bremsung der Axialgeschwindigkeit nicht mehr zu erhöhter Radialgeschwindigkeit und damit erhöhter Wandkollisionsrate. Wenn nach einer Wandkollision zufällig die resultierende Radialgeschwindigkeit sehr niedrig ist, folgt anschließend eine außergewöhnlich lange Beschleunigungsphase; wenn das Teilchen dann das nächste Mal die Wand trifft, ist zusätzlich die Bremsung gegenüber der Bremsung bei einem langsameren Aufprall effektiv vermindert, denn der Aufprallwinkel Θ (s. Abb. 3.8 auf Seite 55) liegt dann nahezu bei 90° , so daß durch geometrische Abschirmung die Wand effektiv verminderte Rauigkeit hat. Die mittlere Axialgeschwindigkeit eines einzigen Teilchens liegt also immer wesentlich höher als bei Anwesenheit (genügend vieler) anderer Teilchen. Daß diese Betrachtung stimmt,

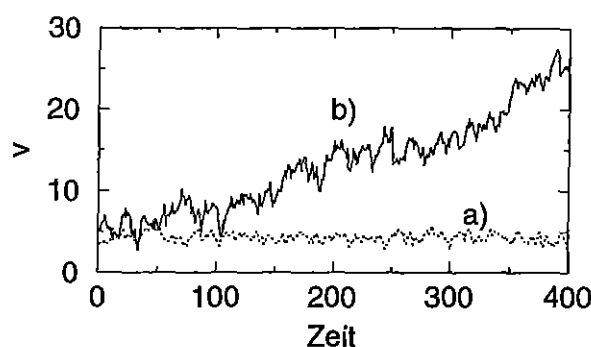


Abbildung 4.9: Vergleich der Evolution je eines Systems wechselwirkender (a) und nicht-wechselwirkender (b) Teilchen. Die natürlichen Fluktuationen in der Axialgeschwindigkeit eines einzelnen Teilchens im Rohr sind hier durch Mittelung über das „Ein-Teilchen-Ensemble“ b) stark reduziert.

läßt sich der Abbildung 4.9 entnehmen, in der die Zeitentwicklung der mittleren Axialgeschwindigkeit zweier Systeme mit $W = 6$ und $\eta = 0.35$ eingetragen ist. System a) entspricht dem in Abbildung 4.8 verwerteten, System b) unterschied sich von erstem dadurch, daß die Teilchen keinerlei Wechselwirkung miteinander hatten. Selbst nach einer Simulationszeit von $400 \sqrt{a/g}$ hat das System nicht-wechselwirkender Teilchen noch keinen stationären Zustand erreicht.

- Bei den Packungsdichten größer als $\eta = 0.20$ machen sich Abweichungen von der geforderten Homogenität, also Effekte der Selbstorganisation der Teilchen, bemerkbar. Die großen Rohrbreiten weichen nach oben hin, die kleinen Rohrbreiten nach unten hin vom vorhergesagten Verhalten ab. Zunächst sei das Verhalten der kleinen Rohrbreiten betrachtet. Mit wachsender Packungsdichte steigen die „geometrischen“ Zwänge auf die Teilchen; besonders bei $W = 6$ zeigt sich eine Tendenz, die Teilchen in Schichten anzuordnen, die sich auch sehr gut in Filmen der Systementwicklung beobachten läßt. Diese Schichtanordnung wird an der Wand, die ja eine besonders geordnete Anordnung von Teilchen darstellt, ausgelöst und pflanzt sich ins Systeminnere fort. Bei Packungsdichten mittlerer Größe wie den hier betrachteten bewirkt dies eine Erhöhung der *lokalen* Packungsdichte an der Wand, während im Systeminnern noch keine ausgeprägte Schichtstruktur ausgelöst wird (Abb. 4.10a). Bei den geringen Packungsdichten dagegen ist, wie ebenfalls aus Abb. 4.10a zu entnehmen, die Forderung nach Homogenität noch gut erfüllt. Eine lokale Dichteerhöhung an der Wand bedeutet aber auch erhöhte Rate von Teilchen-Wand-Kollisionen, und daher eine gegenüber dem homogenen Fall verringerte mittlere Axialgeschwindigkeit. Bei den großen Rohrbreiten dagegen haben die Teilchen wesentlich mehr Freiheit, sich zu arrangieren, und eine Schichtstruktur wird selbst bei sehr großen Packungsdichten nicht beobachtet. Stattdessen macht sich die Teilcheninelastizität in Form einer inelastischen Mikrostruktur bemerkbar (vgl. Abschnitt 1.1.4): Bei den größeren Packungsdichten ist in der Mitte des Rohres, also fern von der Wand als Quelle der granularen Temperatur, die lokale Packungsdichte groß, an der Wand dagegen ist

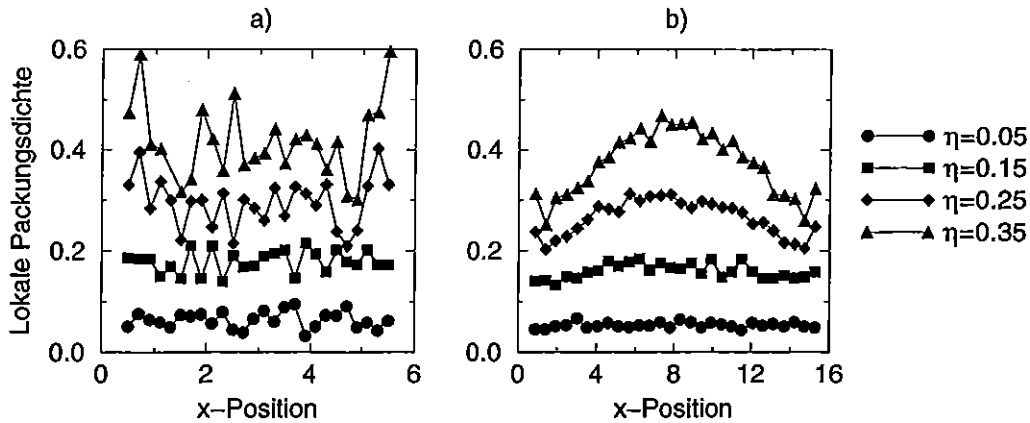


Abbildung 4.10: Profil der lokalen Packungsdichte.

a) in einem Rohr der Breite $W = 6$

b) in einem Rohr der Breite $W = 16$.

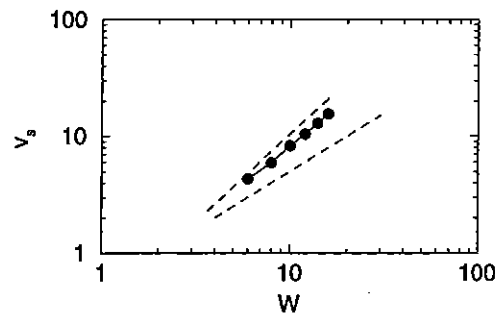


Abbildung 4.11: v_s als Funktion der Rohrbreite W bei der Packungsdichte $\eta = 0.35$. Andere Auftragung von Daten aus Abb. 4.8. Gestrichelte Linien markieren Potenzgesetze der Exponenten 1 bzw. $3/2$.

sie gegenüber dem homogenen Fall verringert (Abb. 4.10b). Diese lokale Dichteverringerng bedeutet aber auch verringerte Rate von Teilchen-Wand-Kollisionen, und daher eine gegenüber dem homogenen Fall erhöhte mittlere Axialgeschwindigkeit. Bei den kleineren Packungsdichten ist die Mikrostruktur wenig ausgeprägt, und die Forderung nach Homogenität bleibt erfüllt.

Das hier untersuchte System ($e_n = 0.9$, $\mu = 0$) ist also bis zu Packungsdichten von $\eta \approx 0.2$ und Rohrbreiten von $W \approx 16$ homogen im Sinne der einfachen Theorie. Bei den höheren Dichten findet bereits ein Übergang zum Bagnold'schen Regime statt, in dem (4.44) gilt. Wie Abb. 4.11 zeigt, nähert sich dort die Abhängigkeit der Axialgeschwindigkeit v_s von der Rohrbreite W einem Potenzgesetz mit Exponent $3/2$ an.

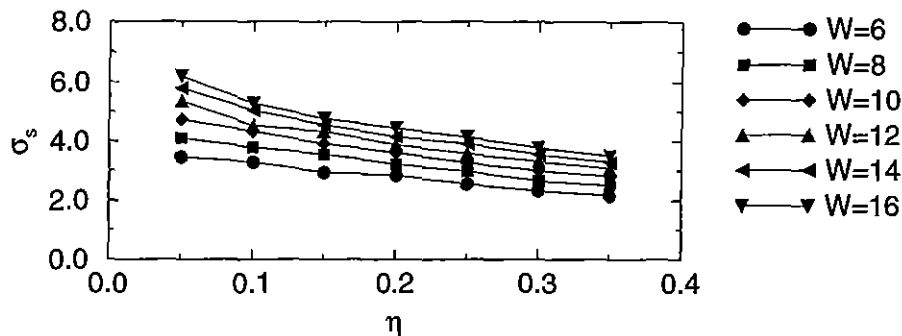


Abbildung 4.12: σ_s als Funktion der Rohrbreite W und der Packungsdichte η , ermittelt durch ED-Simulationen.

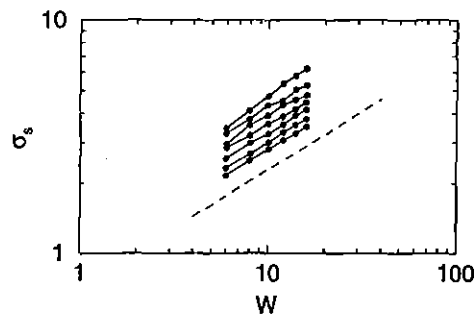


Abbildung 4.13: σ_s als Funktion der Rohrbreite W bei den Packungsdichte $\eta = 0.05$ bis 0.35 (von oben nach unten). Andere Auftragung der Daten aus Abb. 4.12. Die gestrichelte Linie markiert ein Potenzgesetz des Exponenten $1/2$.

4.5.2 σ_s als Funktion von W und η

In Abb. 4.12 ist die thermische Geschwindigkeit σ_s für verschiedene W gegen die Packungsdichte η aufgetragen. Es zeigt sich qualitativ das richtige Verhalten (σ_s sinkt mit steigender Packungsdichte). Die Abhängigkeit ist jedoch viel schwächer als das für das verdünnte Regime durch (4.23) vorausgesagte $\eta^{-1/2}$ -Gesetz und läßt sich auch durch andere Potenzgesetze nicht gut beschreiben. Darüber hinaus zeigt sich eine Abhängigkeit von der Rohrbreite W , die ebenfalls nicht (4.23) folgt, sondern in sehr guter Näherung der Voraussage für das Bagnoldsche Regime, $\sigma_s \propto \sqrt{W}$. Dies läßt sich anhand von Abb. 4.13 nachprüfen. Auch die Tatsache, daß die η -Abhängigkeit weitaus geringer ist als im verdünnten Regime erwartet, ist mit einem eher Bagnoldschen Zustand (keine η -Abhängigkeit) kompatibel.

Offensichtlich ist die thermische Temperatur viel empfindlicher auf Abweichungen von Annahmen der einfachen Theorie als die Axialgeschwindigkeit; ihre W -Abhängigkeit entspricht in allen Bereichen der Packungsdichte der für das Bagnoldsche Regime (Scherung auch weit von der Wand entfernt) vorausgesagten. Die Temperaturerzeugung auch weit von der Wand entfernt scheint also das (über die Rohrbreite gemittelte) σ_s recht stark

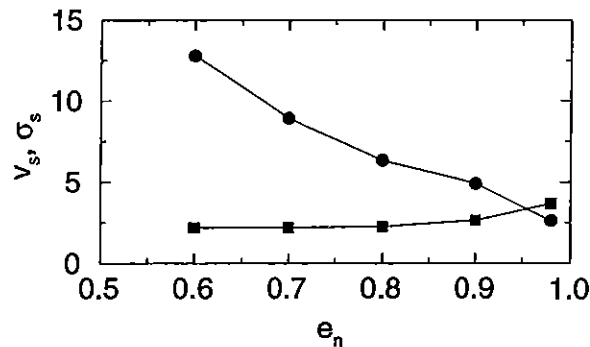


Abbildung 4.14: v_s und σ_s als Funktion des Restitutionskoeffizienten e_n . Durch ED-Simulationen ermittelt an einem System mit $W = 6$, $\eta = 0.25$, $\mu = 0$.
 Volle Kreise: v_s , volle Quadrate: σ_s .

zu beeinflussen, während die thermische Geschwindigkeit an der Wand (und damit v_s) im verdünnten Regime richtig durch die einfache Theorie beschrieben wird.

4.5.3 v_s und σ_s als Funktion von e_n

In Abb. 4.14 ist dargestellt, wie sich die mittlere Axialgeschwindigkeit v_s und die thermische Geschwindigkeit σ_s mit dem Restitutionskoeffizienten e_n ändern. Die Rohrbreite $W = 6$ und die Packungsdichte $\eta = 0.25$ wurden hier konstant gehalten. Es ergibt sich eine Abnahme von v_s und eine Zunahme von σ_s mit steigendem e_n , wie nach obenstehender Analyse der Gleichungen für den stationären Zustand erwartet. Bei einem Restitutionskoeffizienten von $e_n = 0.98$ ist die thermische Geschwindigkeit bereits höher als die mittlere Axialgeschwindigkeit. Dieser Trend setzt sich bei Simulationen mit noch höheren e_n , die hier nicht mehr gezeigt sind, noch fort.

4.5.4 v_s und σ_s als Funktion der Wandrauhigkeit

Um den Einfluß der Wandrauhigkeit auf die stationären Zustände zu ermitteln, wurde bei sonst gleichen Parametern die Größe der Wandteilchen variiert (Abb. 4.15). Es zeigt sich wie vorhergesagt, daß die mittlere Axialgeschwindigkeit recht stark absinkt, wenn sich die Größe der Wandteilchen erhöht. Auch die thermische Geschwindigkeit nimmt bei wachsender Wandrauhigkeit ab, jedoch ist diese Abhängigkeit viel weniger ausgeprägt. Die Voraussage der Gleichungen erfüllt sich also auch hier.

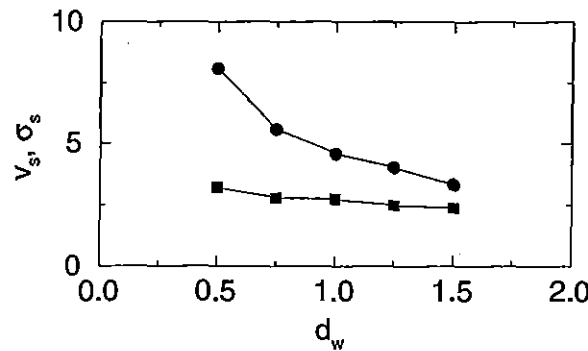


Abbildung 4.15: v_s und σ_s als Funktion des Durchmessers der Wandteilchen, d_w . Durch ED-Simulationen ermittelt an einem System mit $W = 6$, $\eta = 0.25$, $e_n = 0.9$, $\mu = 0$.

Volle Kreise: v_s , volle Quadrate: σ_s .

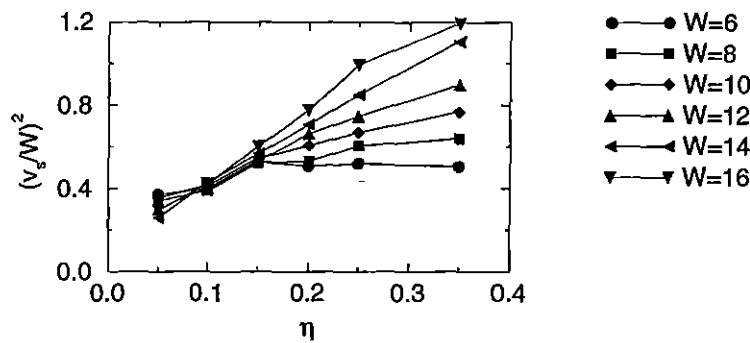


Abbildung 4.16: v_s als Funktion der Rohrbreite W und Packungsdichte η . Durch ED-Simulationen ermittelt an einem System mit $e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$.

4.5.5 Das Verhalten realistischer Systeme

Nachdem die Gültigkeit der einfachen Theorie an einem idealisierten System ($\mu = 0$, d.h. keine Kopplung von Rotations- und Translationsfreiheitsgrad) diskutiert wurde, stellt sich die Frage, inwiefern diese Resultate auch für realistische Systeme mit *endlichem Reibungskoeffizienten* noch gelten. Um dies abzuschätzen, führen wir ED-Simulationen von einem System mit den Materialparametern $e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$ durch.

Es ergibt sich die in Abb. 4.16 dargestellte Abhängigkeit der mittleren Axialgeschwindigkeit v_s von der Rohrbreite W und der Packungsdichte η (vgl. Abb. 4.8). Es zeigt sich, daß Abweichungen vom durch Gleichung (4.22) vorhergesagten Verhalten bereits bei geringeren Packungsdichten als im Fall $\mu = 0$ aufzutreten beginnen. Dies ist in erster Linie der Tat-

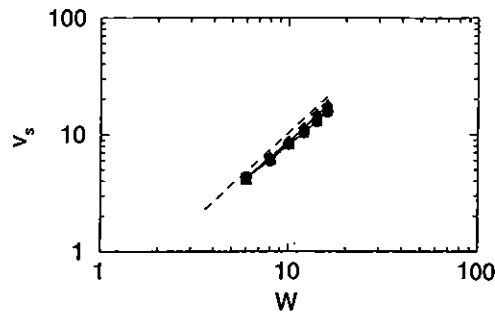


Abbildung 4.17: v_s als Funktion der Rohrbreite W bei den Packungsdichte $\eta = 0.25, 0.35$ und 0.45 . Durch ED-Simulationen ermittelt an einem System mit $e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$. Die gestrichelte Linie markiert ein Potenzgesetz des Exponenten $3/2$.

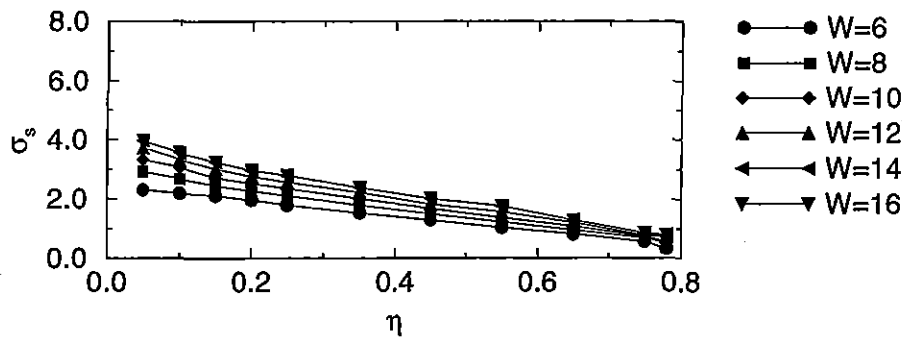


Abbildung 4.18: σ_s als Funktion der Rohrbreite W und der Packungsdichte η . Durch ED-Simulationen ermittelt an einem System mit $e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$.

sache zuzuschreiben, daß aufgrund der Erhöhung von μ die Teilchen-Teilchen-Kollisionen insgesamt dissipativer geworden sind und das System daher eine stärkere Tendenz zum Ausbilden einer radialen Struktur hat als im Fall $\mu = 0$. Aus dem gleichen Grund ist das System auch insgesamt etwas schneller als das idealisierte System $\mu = 0$.

Die Abhängigkeit der Axialgeschwindigkeit von der Rohrbreite ist bei den höheren Packungsdichten wieder in guter Näherung durch ein $W^{3/2}$ -Gesetz beschrieben (Abb. 4.17); darüber hinaus ist hängen in diesem Bereich die Axialgeschwindigkeiten nur unwesentlich von der Packungsdichte ab. Im Bereich höherer Packungsdichte werden also auch realistische Systeme gut durch die Gleichung (4.44) des Bagnoldschen Regimes beschrieben.

Die Abhängigkeit der thermischen Geschwindigkeit σ von Rohrbreite W und Packungsdichte η ist in Abb. 4.18 für einen großen Bereich verschiedener Packungsdichten aufgetragen. Hier bestätigt sich die Voraussetzung des Hagenschen Regimes, daß die thermische Geschwindigkeit im dichtgepackten Regime gegen Null geht und daher für die Dynamik des Systems nicht mehr von großer Bedeutung sein kann. Bis hin zu Packungsdichten von

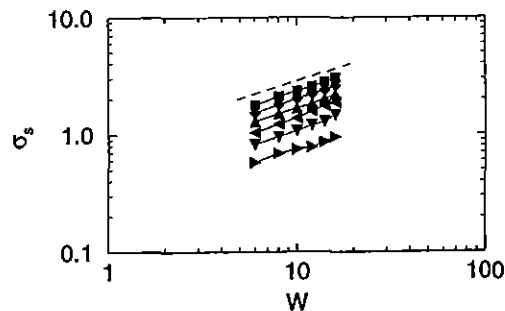


Abbildung 4.19: σ_s als Funktion der Rohrbreite W bei den Packungsdichte $\eta = 0.25$ bis 0.75 (von oben nach unten). Andere Auftragung der Daten aus Abb. 4.18. Die gestrichelte Linie markiert ein Potenzgesetz des Exponenten $1/2$.

$\eta = 0.75$ ist sie jedoch noch deutlich von Null verschieden. Darüber hinaus zeigt die thermische Geschwindigkeit bis hin zu $\eta = 0.75$ eine Wurzelabhängigkeit von der Rohrbreite, wie sie laut (4.45) im Bagnold'schen Regime erwartet wird (Abb. 4.19).

Im nächsten Kapitel werden realistische Systeme in weiten Bereichen des Parameterraums durch Simulationen untersucht.

Kapitel 5

Simulationen zum nichthomogenen granularen Rohrfluß

In diesem Kapitel wenden wir uns Fällen zu, in denen die im vorigen Kapitel entwickelte einfache Theorie granularen Rohrflusses ganz sicher nicht mehr gilt. Das Fließverhalten und die ihm zugrundeliegenden Mechanismen werden daher mit Hilfe von Simulationen erkundet. Zunächst ist es jedoch wichtig, sich über die Anwendbarkeit der beiden in Kapitel 2 diskutierten Methoden auf praktische Fälle Klarheit zu verschaffen.

5.1 Validität und Anwendbarkeit von Simulationen

5.1.1 Bistabilität durch Bremsversagen

Mit den in Kapitel 4 hergeleiteten Gleichungen läßt sich vorhersagen, welchen Einfluß eine unphysikalische Bremsfunktion Δv_y , wie sie sich bei TD-Simulationen von Systemen mit rauhen Wänden ergibt (Abschnitt 3.3), auf das Fließverhalten hat. Die Änderungsrate der mittleren Axialgeschwindigkeit lautete

$$\frac{d}{dt}v = g - \dot{N}_w \langle \Delta^- v \rangle. \quad (4.8)$$

Setzt man nun nicht $\langle \Delta^- v \rangle \propto v$, sondern identifiziert $\langle \Delta^- v \rangle = \frac{1}{N} \Delta v_y(\sigma, v)$ (wobei $\Delta v_y(\sigma, v)$ wegen der Verknüpfung von σ mit dem typischen v_x und von v mit dem typischen v_y eine ganz ähnliche Form wie die Funktion $\Delta v_y(v_x, v_y)$ aus Abschnitt 3.3 hat), so wird unter Berücksichtigung von $\dot{N}_w \propto N\sigma/W$:

$$\frac{d}{dt}v = g - \frac{k}{W} \Delta v_y(\sigma, v) \quad (5.1)$$

und im stationären Zustand

$$\Delta v_y(\sigma, v) = \frac{gW}{k\sigma}, \quad (5.2)$$

worin k eine Konstante ist. Diese Bedingung läßt sich durch graphische Darstellung an-

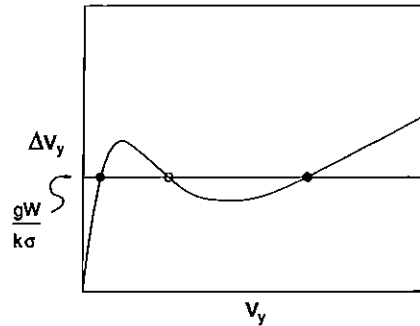


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung von Gleichung (5.2) mit einer Bremsfunktion wie aus Abb. 3.12.

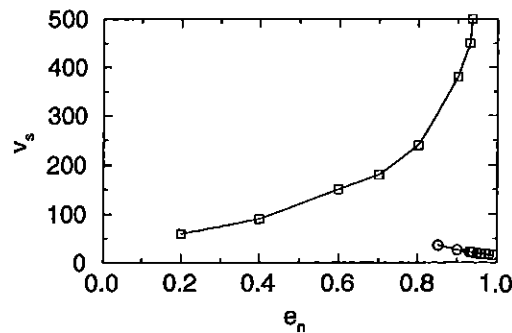


Abbildung 5.2: Bistabilität: Mittlere Axialgeschwindigkeit als Funktion von e_n in einem System der Breite $W = 20$ und Packungsdichte $\eta = 0.55$, simuliert mit zeitschrittgesteuerter (TD-) Molekulardynamik.

Kreise: Physikalischer Zweig. Quadrate: Notbremsen-Zweig.

schaulich interpretieren. In Abb. 5.1 ist eine typische Bremsfunktion $\Delta v_y(v_y)$, wie sie sich bei TD-Simulationen ergibt, schematisch dargestellt (vgl. Abb. 3.12) und der Wert $gW/k\sigma$ als horizontale Linie eingezeichnet. Offenbar gibt es für bestimmte Werte von $gW/k\sigma$ mehrere Lösungen von Gleichung (5.2); jeweils eine im physikalischen Regime, im Bremsversagen-Regime und im Notbremsen-Regime. Wie man sich leicht überzeugt, sind die vollen Kreise in Abb. 5.1 stabile Lösungen, und die durch einen offenen Kreis bezeichnete Lösung ist instabil. Welcher der beiden stabilen stationären Zustände angenommen wird, hängt in einem solchen Fall von den Anfangsbedingungen ab. Liegt $gW/k\sigma$ sehr hoch, kann es vorkommen, daß es keinen physikalischen stationären Zustand mehr gibt und nur noch der Notbremsungs-Zustand übrigbleibt. Im Prinzip ist es möglich, bei empirisch vorgegebenem $\Delta v_y(\sigma, v)$ bzw. $\Delta v_y(v_x, v_y)$ die Transiente gemäß (5.1) und (4.19) numerisch aufzuintegrieren. Stattdessen soll exemplarisch gezeigt werden, wie sich die in Abb. 5.1 dargestellte Bremsfunktion in einer konkreten Simulation auswirken kann.

Simuliert wurde hier ein System der Breite $W = 20$ und der Packungsdichte $\eta = 0.55$. Anders als in den vorigen Simulationen hatten die Wandteilchen einen Durchmesser von $d_w = 0.66$ und die freien Teilchen hatten keinen Rotationsfreiheitsgrad, also sozusagen

unendliche Trägheitsmomente.¹ Der Reibungskoeffizient war $\mu = 0.5$, und der Einfluß des Restitutionskoeffizienten e_n auf die mittlere Axialgeschwindigkeit im stationären Zustand sollte ermittelt werden. Mit einer Federkonstante von $k_n = 2 \times 10^5 \text{ mg/d}$, also gemäß (3.17) und unter Berücksichtigung von $m_{\text{eff}} = 1/2$ einer Kollisionszeit von $t_n = 5.0 \times 10^{-3} \sqrt{d/g}$, ergab sich das in Abb. 5.2 gezeigte Verhalten.² Von Restitutionskoeffizienten nahe eins kommend, zeigte sich zunächst ein Zweig von stationären Zuständen mit relativ geringen Geschwindigkeiten (wie nach den Simulationen der vorigen Abschnitte zu erwarten). Dieser wurde aber für Restitutionskoeffizienten $e_n \lesssim 0.8$ instabil und stattdessen ergab sich ein Zweig mit sehr hohen Geschwindigkeiten, der sowohl zu höheren als auch zu niedrigeren Restitutionskoeffizienten verfolgt werden konnte. Im Bereich hoher e_n lag also offensichtlich Bistabilität vor; welcher von den beiden stationären Zuständen angestrebt wurde, hing hier von den Anfangsbedingungen ab. Die Dichteprofile sowie die Profile der thermischen Geschwindigkeit waren in den beiden Zuständen jeweils gleich.³

Der niedrigliegende Zweig läßt sich im Licht der bisherigen Erkenntnisse als der physikalische Zweig interpretieren; er endet an der Stelle, wo der Wert von $gW/k\sigma$ das Maximum von Δv_y erreicht (σ sinkt mit fallendem e_n , wodurch zwei gleichsinnige Effekte bewirkt werden: $gW/k\sigma$ steigt mit sinkendem e_n , und das Maximum von Δv_y sinkt mit sinkendem e_n). Der Zweig hoher Geschwindigkeiten ist dementsprechend der Notbremsen-Zweig; er sinkt (im Gegensatz zum physikalischen Zweig) mit fallendem e_n , weil die Steigung der Bremsfunktion Δv_y im Bremsversagen-Regime mit fallendem e_n steigt (vgl. Abb. 3.12 auf Seite 57).

Wie in Abschnitt 2.2.3.2 diskutiert, ist Bremsversagen ein generischer Effekt in TD-Simulationen, der durch Verwendung niedrigerer Kontaktzeiten höchstens zu höheren kritischen Geschwindigkeiten v_b verschoben werden kann. Daß sich dadurch in konkreten Situationen aber nicht viel erreichen läßt, ist in Abb. 5.3 zu sehen. Hier ist der physikalische Zweig des gleichen Systems wie zuvor dargestellt und zusätzlich die beiden physikalischen Zweige, die sich durch Reduktion der Kontaktzeit t_n um einen Faktor 10 bzw. 100 ergeben. Durch diese Reduktion bleibt der physikalische Zweig etwas länger stabil (die Abknickungen nach oben bei $k_n = 2 \times 10^5 \text{ mg/d}$ und $k_n = 2 \times 10^7 \text{ mg/d}$ sind bereits Zeichen der beginnenden Instabilität), jedoch steht dieser geringe Gewinn in keinem Verhältnis zu dem zusätzlichen Rechenaufwand (Faktor 10 bzw. 100), der damit verbunden ist.⁴

Bistabilität durch Bremsversagen könnte der Grund dafür sein, daß in vielen Fällen kein stationärer Zustand in TD-Simulationen von schnellen granularen Flüssen gefunden wurde. Walton [238] schilderte, daß bei seinen TD-Simulationen granularen Flusses durch eine Rinne eine Erhöhung der Rinnenbreite (und daher der physikalischen Fließgeschwindigkeit) um ein Geringes den stationären Zustand der mittleren Fließgeschwindigkeit ins scheinbar Unendliche verschob. Die Erklärung für dieses Phänomen ist im hier diskutierten Effekt zu

¹Diese Simulationen wurden zu Beginn dieser Arbeit angestellt.

²Für Teilchen des Durchmessers $d = 6 \text{ mm}$ im Schwerfeld der Erde ($g = 9.81 \text{ m/s}^2$) war also $t_n = 1.2 \times 10^{-4} \text{ s}$.

³Dieses Ergebnis rief, als es erstmals beobachtet wurde, beträchtliche Verwirrung hervor. Die nachfolgende ausführliche Untersuchung brachte zuerst die Erkenntnis, daß die Bremsfunktion $\Delta v_y(v_x, v_y)$ das in Abb. 5.1 dargestellte Verhalten zeigen kann, und nachfolgend die Entdeckung von Bremsversagen als dem zugrundeliegenden fundamentalen Effekt. Die Reihenfolge der Erkenntnisse war also eigentlich umgekehrt als hier dargestellt, und Bremsversagen ein Zufallsfund – wie es in der Wissenschaft häufig der Fall ist [237].

⁴Man beachte, daß bei $k_n = 2 \times 10^9 \text{ mg/d}$ im Falle von $d = 6 \text{ mm}$ und $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ die Kontaktzeit $t_n = 1.2 \times 10^{-6} \text{ s}$ bereits unter der für typische Materialien liegt (vgl. Tabelle 1.1).

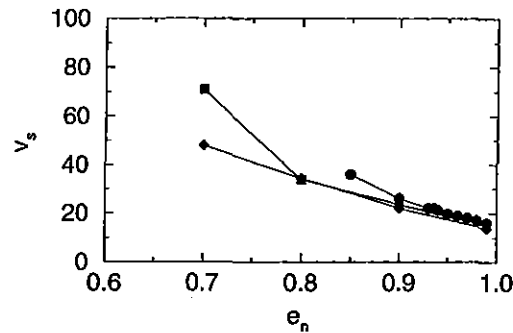


Abbildung 5.3: Instabilität des physikalischen Zweiges bei geringen e_n in einem System der Breite $W = 20$ und Packungsdichte $\eta = 0.55$:

Kreise: $k_n = 2 \times 10^5 \text{ mg/d}$, Quadrate: $k_n = 2 \times 10^7 \text{ mg/d}$, Rauten: $k_n = 2 \times 10^9 \text{ mg/d}$.

suchen: Offensichtlich war durch die Erhöhung der Fließgeschwindigkeit der physikalische Zweig instabil geworden und der Notbremsen-Zweig lag bei so hohen Geschwindigkeiten, daß die Simulation vorher abgebrochen wurde.

5.1.2 Ein „Phasendiagramm“ zur Anwendbarkeit

Die Existenz des oben diskutierten Effekts bedeutet, daß „schnelle“ Systeme der TD-Simulation nicht zugänglich sind und daß in allen Fällen geprüft werden muß, ob sich die Systemeigenschaften mit t_n ändern.⁵

Nur wenn dies nicht der Fall ist, hat man die Gewähr, daß der vorliegende stationäre Zustand physikalisch ist. Zusammen mit den in Abschnitt 2.1.3 diskutierten inhärenten Grenzen der ED-Simulation ergibt sich somit für die Simulation granularer Materie das in Abb. 5.4 skizzierte „Phasendiagramm“ mit Bereichen (A) bis (D). Bereich (A) ist sowohl ED- als auch TD-Simulationen zugänglich. Die Bereiche (B) und (C) sind jeweils die Domänen von ED-Simulationen bzw. TD-Simulationen, während es keine einfache Simulationsmethode zu geben scheint, die sich natürlicherweise für Bereich (D) empfiehlt.

Eine selbstverständlich erscheinende Forderung an Simulationen im Bereich (A) von Abb. 5.4 lautet, daß Resultate unabhängig von der Simulationsmethode sein sollten. Dies erfordert jedoch zunächst, daß die Wechselwirkung zwischen den Teilchen in den jeweiligen Methoden gleich ist. In Abschnitt 3.2 wurde darauf hingewiesen, daß die Verwendung der harmonischen Rückstellkraft (3.14) zusammen mit der Gleitreibungskraft (3.30) bei TD-Simulationen das gleiche Kollisionsverhalten zeigt wie der Kollisionsoperator (Abschnitt 2.1.1) mit der speziellen Wahl $e_s = 0$ bei ED-Simulationen. Unter diesen Umständen kann man an einem System aus Bereich (A) die Äquivalenz der beiden Methoden exemplarisch überprüfen. In Abb. 5.5 ist die mit ED sowie mit TD simulierte Evolution der

⁵Dies wurde bei allen im folgenden gezeigten TD-Simulationen natürlich sichergestellt. Die typische kritische Geschwindigkeit für das Auftreten von Bremsversagen lag in der vorliegenden Geometrie und bei durchgehender Verwendung von $k_n = 2 \times 10^5 \text{ mg/d}$ bei $v_b \approx 20\sqrt{dg}$ und wurde in keinem Fall überschritten.

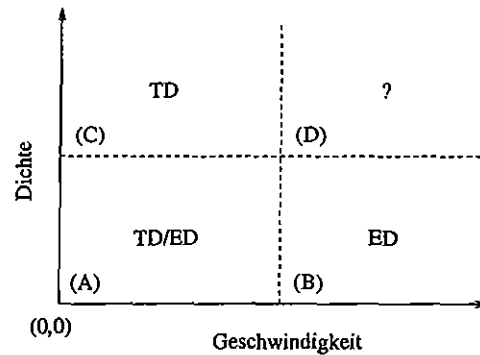


Abbildung 5.4: „Phasendiagramm“ für die Simulation fließender granularer Materie.

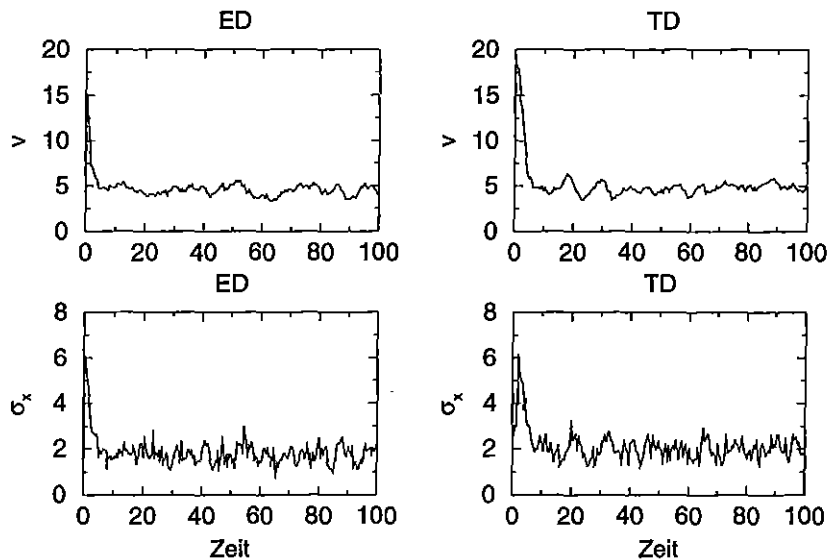


Abbildung 5.5: Vergleich von ED- und TD-Simulationen an einem System der Breite $W = 6$, Packungsdichte $\eta = 0.25$ sowie den Materialparametern $e_n = 0.9$, $\mu = 0.5$, $e_s = 0$.

mittleren Axialgeschwindigkeit v sowie der thermischen x -Geschwindigkeit σ_x für ein solches Beispielsystem im Vergleich dargestellt. Die Anfangsbedingungen waren hier nahezu gleich, aber nicht identisch. Es zeigt sich, daß Evolutionen und stationäre Zustände gut übereinstimmen. In Abschnitt 5.3 werden daher TD- und ED-Simulationen komplementär eingesetzt werden können.

5.2 Breite Systeme: Radiale Struktur

In Kapitel 4 wurde die Annahme gemacht, daß die Flußvariablen v und σ homogen seien. Dies ist in Wirklichkeit nicht der Fall, wie bereits ein kurzer Blick auf die räumliche Struktur der Quellen und Senken von v und σ zeigt. Während die Quelle der mittleren Ge-

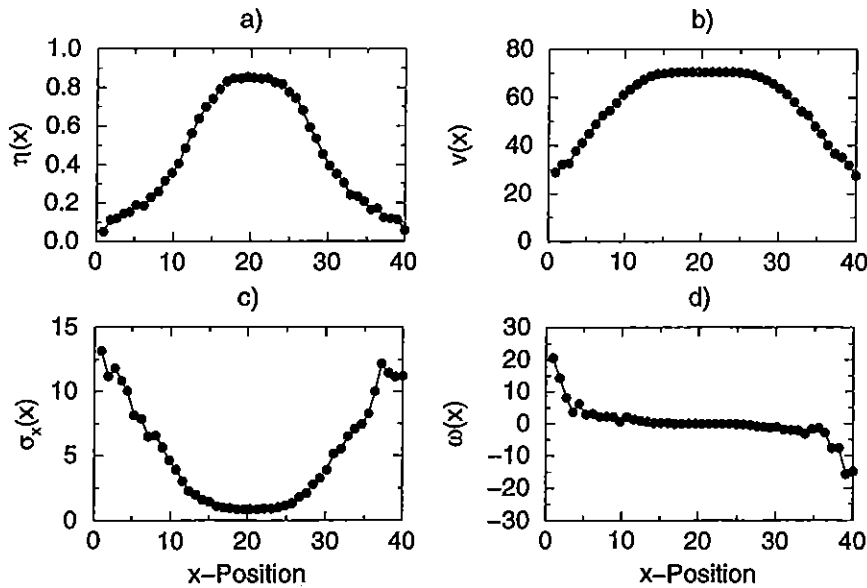


Abbildung 5.6: Profile der Flußvariablen im stationären Zustand. ED-Simulation eines Systems der Breite $W = 40$ (Länge $L = 20$) und Packungsdichte $\eta = 0.45$ (innere Parameter $e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$).

- a) Packungsdichte $\eta(x)$
- b) Axialgeschwindigkeit $v(x)$
- c) Thermische Geschw. in x -Richtung $\sigma_x(x)$
- d) Winkelgeschw. $\omega(x)$.

schwindigkeit v die Gravitationsbeschleunigung ist, also ein homogenes Feld, ist die Senke von v an der Wand lokalisiert. Man erwartet daher ein Profil $v(x)$ mit einem Maximum in der Mitte und Minima an den Wänden. Die Quelle der granularen Temperatur σ ist an der Wand lokalisiert, während die entsprechende Senke die gleiche räumliche Struktur wie die Dichte η hat. Es ergibt sich ein Profil $\sigma(x)$ mit einem Minimum in der Mitte und Maxima an den Wänden. Dies wiederum erlaubt einen Rückschluß auf die räumliche Struktur der Dichte η : Wegen des Dilatanzprinzips erwartet man geringe Dichte, wo die granulare Temperatur hoch ist und hohe Dichte, wo sie niedrig ist; daraus folgt ein Profil $\eta(x)$ mit einem Maximum in der Mitte und Minima an den Wänden, wie es bereits in Abb. 4.10b (S. 82) zu sehen war.

Die radiale Struktur wird umso ausgeprägter sein, je breiter und je inelastischer das System ist. Im Grenzfall sehr breiter Systeme kann man erwarten, daß die thermische Geschwindigkeit im Innern fast bis auf Null absinkt und das Profil der Axialgeschwindigkeit nicht mehr gerundet ist, sondern stumpf. Dieses *plug flow* („Pfropfenfluß“) genannte Phänomen wurde sowohl in Experimenten beobachtet [5, 7, 56, 239, 240] als auch in mehreren theoretischen Untersuchungen vorhergesagt [100, 102, 114, 121]. Zur Illustration zeigt Abb. 5.6 die Profile der wichtigsten Flußvariablen, wie sie sich bei einem sehr breiten System im stationären Zustand ergeben. Wie vorausgesagt, zeigt sich hier ein Pfropf sehr hoher Dichte in der Mitte des Systems und ein stumpfes Profil der Axialgeschwindigkeit, während die Scherzonen an den Rändern die typische Breite von etwa 10 Teilchendurchmessern

aufweisen (vgl. die Diskussion in Abschnitt 1.1.5). Die thermische x -Geschwindigkeit hat sehr hohe Werte an der Wand und fällt zur Mitte hin fast auf Null ab (die thermische y -Geschwindigkeit, hier nicht gezeigt, weist das gleiche Verhalten auf). Entsprechendes gilt für die Winkelgeschwindigkeit.

Bei Rohrbreiten wie jenen, die im Rahmen dieser Arbeit im Vordergrund stehen, ist die radiale Struktur nicht so ausgeprägt wie in Abb. 5.6 gezeigt – insbesondere überspannen die Scherzonen noch die gesamte Breite des Rohres und das Profil der Axialgeschwindigkeit bleibt gerundet. Daß die radiale Struktur dennoch eine erhebliche Rolle für das Systemverhalten spielt, wurde schon in Abschnitt 4.5.1 belegt.

Es gibt Hinweise [241], daß die Breite der Scherzonen u.a. eine Funktion der Packungsdichte η ist. Anscheinend bildet sich in breiteren, dichten Systemen ein Pfropf, der stets die lokale Dichte $\eta(x) \approx 0.82$ aufweist. Je verdünnter dann das System ist, desto mehr Platz bleibt durch diese radiale Selbstorganisation für die Scherzonen an den Rändern. Die Tatsache, daß simulierte Transienten durch die einfache Theorie auch bei relativ hohen Packungsdichten noch sehr gut approximiert werden (s. Abschnitt 4.4, insbesondere Abb. 4.4), dürfte letztlich auf die radiale Selbstorganisation zurückzuführen sein. Die Annahme der einfachen Theorie, alle Scherung finde an der Wand statt, wird ja durch die Existenz eines Pfropfes, der von engen Scherzonen umgeben ist, gerade realisiert.

5.3 Dichte Systeme: Erzwungene Ordnung

Während im vorigen Kapitel das Verhalten verdünnter granularer Systeme theoretisch und durch Simulationen behandelt wurde, ist das Verhalten der moderat dichten und dichten Systeme nicht minder interessant. Beispielsweise kann man sich die Frage stellen, wie die Fortsetzung von Abb. 4.16 (S. 85) zu hohen Packungsdichten hin aussieht. Offenbar kann die mittlere Axialgeschwindigkeit v_s nicht monoton mit η ansteigen, denn bei sehr hohen η ist die für den Fluß notwendige Dilatanz geometrisch frustriert, und das Material bleibt einfach stecken ($v_s \rightarrow 0$). Nach den Ergebnissen von Abschnitt 5.1.2 ist es zulässig, die in Abb. 4.16 gezeigten ED-Simulationen zu den höheren Dichten hin durch TD-Simulationen fortzusetzen. Das durch eine derartige Ergänzung entstandene Geschwindigkeits-Dichte-Diagramm ist in Abb. 5.7 dargestellt. Alle Systeme weisen ein Maximum der Axialgeschwindigkeit bei mittleren Packungsdichten auf und werden bei hohen Packungsdichten wieder langsamer (beim letzten aufgetragenen Wert $\eta = 0.78$ ist noch kein völliger Stillstand erfolgt; von dort fällt die Axialgeschwindigkeit aber durch Hinzufügen nur weniger weiterer Teilchen brüsk auf nahezu Null). Der mikroskopische Grund hierfür ist, daß bei den hohen Packungsdichten Mehrteilchen-Wechselwirkungen immer häufiger werden, daß also eine Art Übergang von einem granularen Gas zu einer granularen Flüssigkeit und schließlich zu einer quasikristallinen granularen Struktur erfolgt. Dieser läßt sich sehr gut an der radialen Orts-Orts-Korrelationsfunktion $g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ beobachten, die in Abb. 5.8 für sechs verschiedene Werte der Packungsdichte η aufgetragen ist (hier am Beispiel der Rohrbreite $W = 10$).

Während bei $\eta = 0.25$ noch fast keine Struktur vorhanden ist, so daß der Fall des „granularen Gases“ vorliegt, wächst zu höheren Packungsdichten hin ein deutliches Paarkorrelationsmaximum sowie Maxima zu höheren Korrelationen, was auf einen dichtgepack-

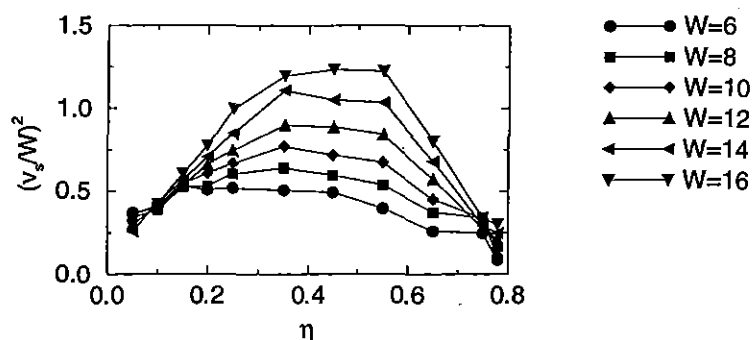


Abbildung 5.7: v_s als Funktion der Rohrbreite W und Packungsdichte η bei einem System mit $e_n = 0.9$ und $\mu = 0.3$. Bis $\eta = 0.45$: ED-Simulationen, $\eta \geq 0.55$: TD-Simulationen.

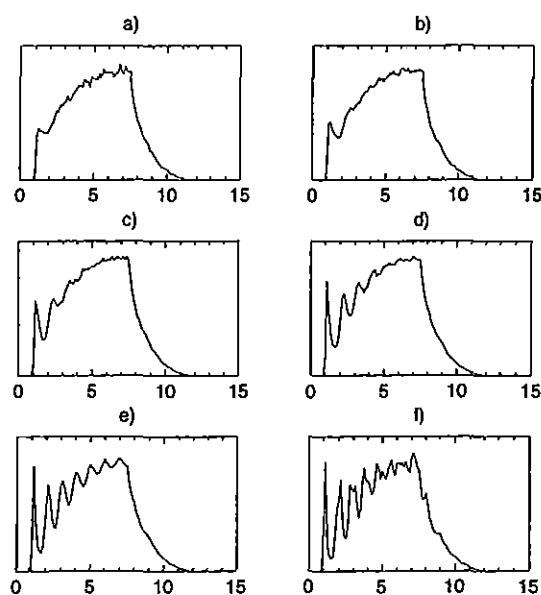


Abbildung 5.8: Radiale Korrelationsfunktion für $W = 10$ und sechs verschiedene Packungsdichten ($e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$). Abszisse: Abstand der Teilchenzentren in d , Ordinate: Häufigkeit in willkürlichen Einheiten.

a) $\eta = 0.25$, b) $\eta = 0.35$, c) $\eta = 0.45$, d) $\eta = 0.55$, e) $\eta = 0.65$, f) $\eta = 0.75$

ten und geordneten, quasikristallinen Zustand hinweist.⁶ Das gleiche Bild ergibt sich bei Betrachtung des Dichteprofiles (Abb. 5.9). Hier ist insbesondere gut zu sehen, wie das granulare System durch die geometrischen Zwänge eine Schichtstruktur annimmt. In einem

⁶Der starke Abfall der radialen Korrelationsfunktion jenseits eines Teilchen-Teilchen-Abstandes von etwa $7.5 d$ ist eine Folge der endlichen Länge der Rechenzelle, $L = 15 d$: Teilchen können in y -Richtung höchstens einen Abstand von $7.5 d$ haben.

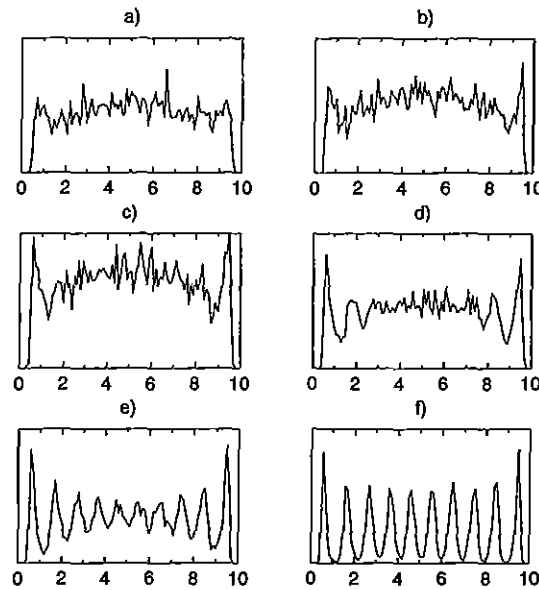


Abbildung 5.9: Dichteprofil für $W = 10$ und sechs verschiedene Packungsdichten ($e_n = 0.9$, $\mu = 0.3$). Abszisse: x -Position in d , Ordinate: Lokale Packungsdichte in willkürlichen Einheiten.

a) $\eta = 0.25$, b) $\eta = 0.35$, c) $\eta = 0.45$, d) $\eta = 0.55$, e) $\eta = 0.65$, f) $\eta = 0.75$

solchen dichten und geordneten Zustand kann es leicht zu der bereits in Abschnitt 1.1.2 besprochenen dynamischen Gewölbebildung kommen, was sich in einer gegenüber dem Einfall einzelner Teilchen auf die Wand wesentlich effektiveren Bremsung des granularen Materials bemerkbar macht. Während also der im vorigen Kapitel besprochene Mechanismus der dissipativen Kühlung weiterhin aktiv ist und eine Tendenz zum Anwachsen der Axialgeschwindigkeit mit steigender Packungsdichte bewirkt, besitzt er in der geometrisch erzwungenen Ordnung einen starken Antagonisten, der dazu führt, daß bei hohen Packungsdichten anders als im „granularen Gas“ pro Teilchen-Wand-Kontakt gleich mehrere Teilchen abgebremst werden. Als Nettoeffekt ergibt sich das beobachtete Absinken der Axialgeschwindigkeit jenseits $\eta \approx 0.55$.

In vielen praktischen Fällen ist man weniger an der Axialgeschwindigkeit des Systems als vielmehr an der *Flußdichte* durch das Rohr interessiert, also an $\Phi = v_s \eta / W$. Eine Auftragung von Φ gegen η wird in der Verkehrswissenschaft [242] *Fundamentaldiagramm* genannt und hat dort eine große Bedeutung für die Effizienz von bestehenden und Auslegung von neuen Verkehrswegen. Eine Auftragung der Resultate aus Abb. 5.7 in der Form eines Fundamentaldiagramms zeigt Abb. 5.10. Es ist zu beachten, daß es sich hierbei im Sinne des in dieser Arbeit verfolgten Ansatzes um ein „lokales“ Fundamentaldiagramm für axial homogene Rohrsektionen handelt. Der Übergang von lokalen zu globalen Fundamentaldiagrammen wird in Abschnitt 5.5.3 kurz angesprochen werden. Das Maximum der Flußdichte ist in diesem Diagramm gegenüber dem Maximum der Axialgeschwindigkeit aus Abb. 5.7 zu höheren Packungsdichten verschoben.

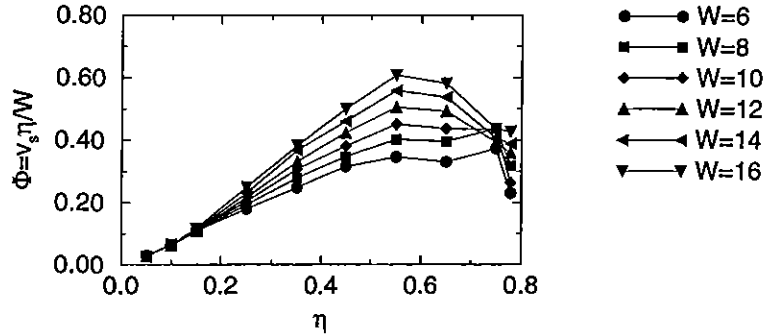


Abbildung 5.10: Fundamentaldiagramm: $\Phi = v_s \eta / W$ als Funktion der Rohrbreite W und Packungsdichte η in einem System mit $e_n = 0.9$ und $\mu = 0.3$. Andere Darstellung der Daten aus Abb. 5.7.

5.4 Inelastische Systeme: Teilchenpaare

Bisher sind in dieser Arbeit ausschließlich relativ elastische Körnchen betrachtet worden. Es stellt sich aber die Frage, ob die Voraussage der einfachen Theorie, daß sich die Axialgeschwindigkeit eines granularen Rohrflusses für inelastischere Teilchen vergrößert (vgl. Abb. 4.14, S. 84), auch im Grenzfall sehr niedriger Restitutionskoeffizienten e_n noch zutrifft. Da man in den breiteren Systemen mit inelastischen Teilchen schnell in den Bereich hoher Axialgeschwindigkeiten gerät, auf der anderen Seite jedoch für stark inelastische Teilchen nur TD-Simulationen in Frage kommen, muß man sich nach dem „Phasendiagramm“ Abb. 5.4 zur Untersuchung inelastischer Systeme auf schmale Rohre beschränken, in denen die mittlere Axialgeschwindigkeit eher niedrig ist.

Die in Abb. 5.11 gezeigten Resultate wurden daher in einem System der Breite $W = 6$ (und Länge $L = 9$) gewonnen. Bei festem Reibungskoeffizienten $\mu = 0.5$ wurden der Restitutionskoeffizient e_n und die Packungsdichte η variiert. Es zeigt sich, daß für alle verwendeten Packungsdichten ein Maximum in der Axialgeschwindigkeit v_s auftritt: Stark inelastische Systeme werden entgegen der Voraussage der einfachen Theorie wieder langsamer. Das Maximum liegt bei umso höheren Werten von e_n , je größer die Packungsdichte ist. Zu beachten ist auch, daß inelastische Systeme generell mit steigender Packungsdichte langsamer werden, ebenfalls im Widerspruch zu den Aussagen der einfachen Theorie. Nebenbei sei bemerkt, daß sich für das System mit der höchsten Packungsdichte $\eta = 0.75$ nur eine sehr geringe Variation der Axialgeschwindigkeit mit e_n ergibt. Dies liegt an der aufgrund geometrischer Zwänge sehr geringen Freiheit zur Selbstorganisation, die diesem System verbleibt (s. Diskussion im vorigen Abschnitt).

Zur Diskussion dieser Phänomene ist es wieder nützlich, die Gleichungen der einfachen Theorie zu betrachten. Es gilt

$$\frac{d}{dt}v = g - \dot{N}_w \langle \Delta^- v \rangle, \quad (4.8)$$

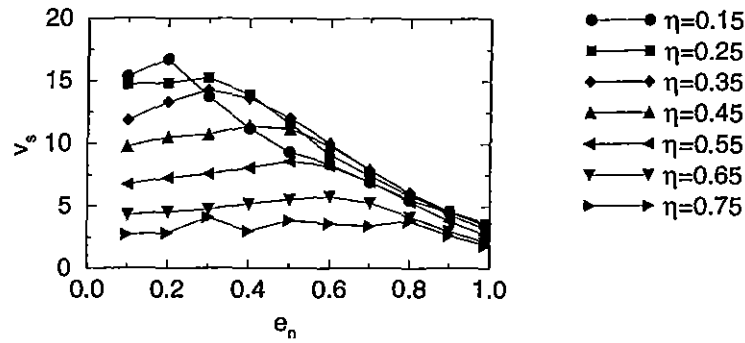


Abbildung 5.11: v_s als Funktion der Packungsdichte η und des Restitutionskoeffizienten e_n in einem System der Breite $W = 6$ und des Reibungskoeffizienten $\mu = 0.5$. Ermittelt mit TD-Simulationen.

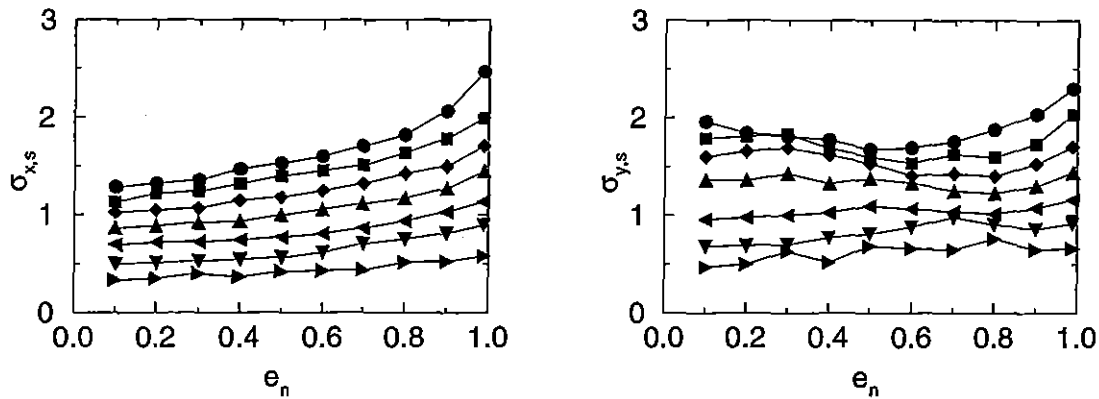


Abbildung 5.12: Thermische x - bzw. y -Geschwindigkeit $\sigma_{x,s}$ und $\sigma_{y,s}$ als Funktion der Packungsdichte η und des Restitutionskoeffizienten e_n . Gleiches System wie in Abb. 5.11

wo $\dot{N}_w \propto N\sigma/W$ die Wandkollisionsrate und $\langle \Delta^- v \rangle \propto v/N$ der mittlere Verlust an Axialgeschwindigkeit pro Teilchen-Wand-Kollision war; im stationären Zustand ist also $v_s \propto gW/\sigma_s$. Der Anstieg der Axialgeschwindigkeit v_s mit fallendem, aber noch nicht zu geringem e_n ist darauf zurückzuführen, daß σ_s wegen der effizienteren dissipativen Kühlung mit fallendem e_n sinkt (der mittlere Verlust an Axialgeschwindigkeit $\langle \Delta^- v \rangle \propto v/N$ hängt, wie entsprechende Probesimulationen zeigen, nur sehr geringfügig von e_n ab). Dies ist in der Tat, wie Abb. 5.12 zeigt, für die x -Komponente der thermischen Geschwindigkeit (auf die es bei der Wandkollisionsrate \dot{N}_w ja ankommt) auch bis hin zu sehr geringen e_n erfüllt. Anders ist die Situation bei der y -Komponente der thermischen Geschwindigkeit. Sie beginnt bei niedrigen Restitutionskoeffizienten vom Verlauf der x -Komponente abzuweichen und dies umso früher, je höher die Packungsdichte η ist: Es zeigt sich eine Tendenz zum Anwachsen. Hieran sind drei Dinge bemerkenswert: Zum einen ist die Thermalisierung

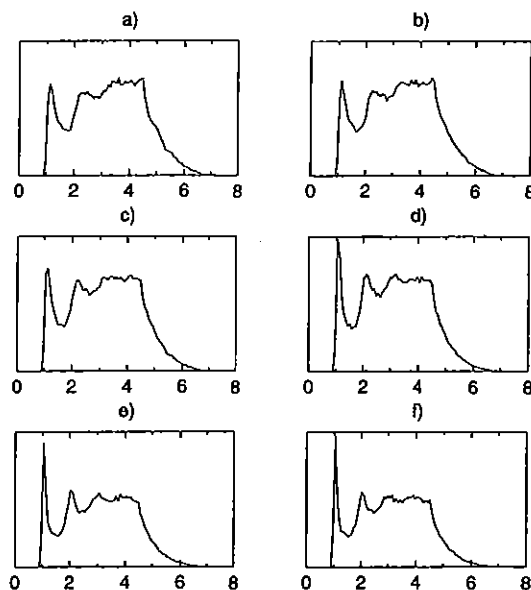


Abbildung 5.13: Radiale Korrelationsfunktion für $W = 6$, $\eta = 0.45$ und sechs verschiedene Restitutionskoeffizienten. Abszisse: Abstand der Teilchenzentren in d , Ordinate: Häufigkeit in willkürlichen Einheiten.

a) $e_n = 0.99$, b) $e_n = 0.9$, c) $e_n = 0.7$, d) $e_n = 0.5$, e) $e_n = 0.3$, f) $e_n = 0.1$

bei niedrigen Restitutionskoeffizienten nicht mehr effektiv genug, daß sich die „anisotrope Heizung“ der y -Komponente an der Wand auch der x -Komponente mitteilt; zum zweiten verhält sich σ_x wie in der einfachen Theorie erwartet und kann daher nicht für den Abfall der Axialgeschwindigkeit bei niedrigen e_n verantwortlich sein. Zum dritten aber ist der Anstieg von σ_y bei kleinen e_n unerwartet und hängt möglicherweise mit dem Abfall der Axialgeschwindigkeit zusammen.

Tatsächlich ist der gleiche Mechanismus, der für die Zunahme der Axialgeschwindigkeit bei hohem, doch fallenden e_n sorgt, auch für ihr Wiederanwachsen bei sehr niedrigen Restitutionskoeffizienten verantwortlich: Dissipative Kühlung. Ein niedriger Restitutionskoeffizient bewirkt eine hohe Tendenz der Teilchen, sich zu geordneten Strukturen zusammenzufinden. Abb. 5.13 zeigt die radiale Korrelationsfunktion eines Beispielsystems ($\eta = 0.45$) in Abhängigkeit von e_n . Besonders bemerkenswert ist hier das Paarkorrelationsmaximum bei einem Teilchenabstand von $1 d$, also unmittelbar benachbarten Teilchen, der bei sinkenden e_n immer prominenter wird und weit über alle anderen Korrelationen hinausragt. Was geschieht, wenn solch ein Paar von nahe benachbarten, inelastischen Teilchen auf die Wand trifft? Grundsätzlich gibt es zwei Möglichkeiten, abhängig von der initialen Separation s_0 , der initialen Geschwindigkeit v_0 und der Kollisionszeit t_n der Körnchen (vgl. Abschnitt 2.2.3.1). Wenn $s_0/v_0 \ll t_n$, kommt es zu einem multiplen Kontakt des wandnäheren Teilchen mit dem wandfernen Teilchen und der Wand. Wenn $s_0/v_0 \gg t_n$, stößt das wandnähere Teilchen zuerst mit der Wand, verliert dabei aber im Schnitt soviel von seiner Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Wand, daß es anschließend noch vom wandfernen Teilchen getroffen wird. Dadurch wird es wieder auf die Wand zugeschleu-

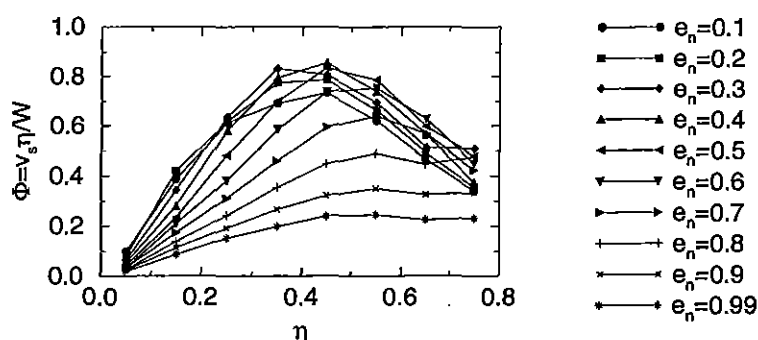


Abbildung 5.14: Fundamentaldiagramm: $\Phi = v_s \eta / W$ als Funktion der Packungsdichte η und des Restitutionskoeffizienten e_n in einem System der Breite $W = 6$ und des Reibungskoeffizienten $\mu = 0.5$. Andere Darstellung der Daten aus Abb. 5.11.

nigt, stößt ein weiteres Mal mit der Wand, und so fort. Beide Situationen, der multiple Kontakt und der mehrfache Stoß, haben den gleichen Effekt: Bei der Annäherung des Paares an die Wand werden beide Teilchen gebremst. Hier wird also die Annahme der einfachen Theorie verletzt, daß Wechselwirkungen zwischen Teilchen und Wand nur in Form von binären Kollisionen vorkommen. Durch den Paarbremsmechanismus, der mit sinkendem e_n und steigender Packungsdichte immer häufiger vorkommt und immer effektiver wird, muß die Axialgeschwindigkeit sinken. Gleichzeitig ist der erneute Anstieg in der thermischen y -Geschwindigkeit erklärt. Daß dieser Anstieg nicht auf die thermische x -Geschwindigkeit übertragen wird, liegt an der insgesamt geringen thermischen Beweglichkeit der Teilchen und dem hohen Verlust an Relativgeschwindigkeit bei jedem Stoß, der eine Thermalisierung im Innern des Systems stark erschwert.

Es ist wiederum instruktiv, die Daten aus Abb. 5.11 in Form eines Fundamentaldiagramms darzustellen, wie in Abb. 5.14 geschehen. Hier tritt deutlich zutage, daß inelastische Teilchen zu einer wesentlich höheren Flußdichte führen als elastische und daß bei gegebener Rohrbreite der Fluß für mittlere (lokale) Packungsdichten und relativ inelastische Teilchen maximal wird.

5.5 Lange Systeme: Dichtewellen

Wie bereits in Abschnitt 4.1.1 angesprochen, bleiben granulare Rohrflüsse auf großen axialen Längenskalen nicht homogen; es bilden sich Zonen unterschiedlicher Packungsdichte, die sich mit jeweils unterschiedlicher Geschwindigkeit entlang des Rohres fortbewegen. Diese sogenannten Dichtewellen lassen sich sowohl in Experimenten [243–245] als auch in Simulationen [38, 221, 225] feststellen.⁷ Der Ursprung der Inhomogenität ist zunächst in

⁷In den Experimenten ist aber nachweislich das interstitielle Medium Luft von großer Bedeutung [245, 246], während alle Simulationen von einem Fluß im Vakuum ausgehen.

der inelastischen Mikrostruktur (Abschnitt 1.1.4) zu suchen. Die Art und Weise, wie solche Inhomogenitäten sich entwickeln, ist aber durch andere Gesetze bestimmt. Zum einen kann man an eine dynamische Instabilität der homogenen Lösung der Bewegungsgleichung denken, die zu einer wellenartigen Ausbreitung kleiner Störungen der Homogenität führt (dynamische Wellen). Lighthill und Whitham beschrieben 1955 aber einen zweiten Typ von Wellen, der sich ohne explizite Kenntnis einer Bewegungsgleichung allein aus der Kontinuitätsgleichung und der Existenz einer wohldefinierten Fluß-Dichte-Beziehung (einem Fundamentaldiagramm) ergibt. Der kräftefreien Formulierung wegen nannten sie diesen Wellentyp *kinematische Wellen*.

5.5.1 Kinematische Wellen

Betrachtet sei ein beliebiges quasi-eindimensionales Fließproblem, auf das sich eine Kontinuumsbeschreibung anwenden läßt. In Abhängigkeit der Raumkoordinate z werde eine lokale mittlere Konzentration k und eine lokale mittlere Geschwindigkeit v gemessen; der lokale Fluß ergibt sich aus $q = kv$. Die Kontinuitätsgleichung lautet dann:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial z} = 0. \quad (5.3)$$

Existiert nun eine funktionale Abhängigkeit $q = q(k, z)$, so ist

$$\left. \frac{\partial q}{\partial k} \right|_{z=\text{const.}} =: c(k, z) \quad (5.4)$$

wohldefiniert und Multiplikation von (5.3) mit (5.4) liefert

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c \frac{\partial q}{\partial z} = 0, \quad (5.5)$$

eine Wellengleichung erster Ordnung für q . Die Wellengeschwindigkeit (5.4) ergibt sich aus der Steigung des Fundamentaldiagramms $q(k)$ und läßt sich auch durch die mittlere Geschwindigkeit v ausdrücken:

$$c = \frac{\partial q}{\partial k} = \frac{\partial(vk)}{\partial k} = v(k) + k \frac{\partial v}{\partial k}. \quad (5.6)$$

Die Wellengeschwindigkeit c ist also größer als v , wenn v mit k steigt (wie beispielsweise in Bächen, wenn k den Wasserpegel mißt) und sie ist kleiner als v , wenn v mit k sinkt (wie beispielsweise bei dichtgepackter granularer Materie – Abschnitt 5.3 – oder bei Verkehrsflüssen im dichten Regime).

Wenn $c = \partial q / \partial k$ eine Funktion von k ist (also bei nichtlinearem Fundamentaldiagramm $q(k)$), werden sich Regionen unterschiedlicher Konzentration unterschiedlich schnell ausbreiten. Das bedeutet insbesondere, daß sie einander einholen und wechselwirken können. Dies führt, ganz wie bei Schockwellen in Gasen, zur Ausbildung von sehr scharfen Konzentrationsstufen, die deshalb auch kinematische Schockwellen genannt werden. Die Geschwindigkeit einer solchen Schockwelle ergibt sich durch folgende Betrachtung: Es seien k_1 und q_1 bzw. k_2 und q_2 die Konzentrationen und Flüsse diesseits und jenseits der Stufe und u die Geschwindigkeit, mit der die Stufe sich fortbewegt. Der Materiefluß durch die

Stufe läßt sich dann sowohl durch $q_1 - uk_1$ als auch durch $q_2 - uk_2$ ausdrücken. Auflösen dieser Gleichung nach u liefert

$$u = \frac{q_2 - q_1}{k_2 - k_1}. \quad (5.7)$$

Die Geschwindigkeit der Front ist also gegeben durch die Steigung der Geraden, welche die zwei Punkte $q_1(k_1)$ und $q_2(k_2)$ im Fundamentaldiagramm verbindet. Leibig zeigte 1994, daß viele kleine Störungen der Homogenität, die sich gemäß Gleichung (5.7) ausbreiten, sich tatsächlich bald zu einer scharfen Konzentrationsstufe vereinigen. Hierbei verwendete er eine spezielle Form des Fundamentaldiagramms, das aus der Verkehrswissenschaft bekannte Greenshields-Modell $q(k) \propto k(1 - k)$. Das Resultat muß aber unabhängig von der speziellen Wahl für alle konvexen Fundamentaldiagramme gelten.

Lighthill und Whitham wandten ihre Theorie auf die Ausbreitung von Flutwellen in Flüssen und auf Verkehrsprobleme im dichten Regime an. Cowin zeigte 1983 [233], daß auch der Fluß granularer Materie sich durch die Theorie beschreiben läßt und große formale Ähnlichkeit mit Verkehrsflüssen aufweist. Tatsächlich haben die in dieser Arbeit bestimmten Fundamentaldiagramme (Abb. 5.10 und 5.14) eine ganz ähnliche Form wie jene, die für Autoverkehr gemessen [247–249] und simuliert [250–254] wurden.⁸

5.5.2 Stationäre und dynamische Fundamentaldiagramme

In der Theorie kinematischer Wellen wird implizit angenommen, daß der zu einer Konzentration k gehörige Fluß $q(k)$, und also die entsprechende Geschwindigkeit $v(k)$, sich ohne jede Verzögerung einstellt (instantane Adaptation). Dies ist natürlich in realen Systemen nicht zu erwarten; es wird immer eine gewisse „Transientenzeit“ vergehen, bis ein Abschnitt, der durch Zufluß oder Abfluß von Materie seine Konzentration k verändert, die entsprechend veränderte Geschwindigkeit $v(k)$ angenommen hat. Des weiteren ist zu erwarten, daß die Wohldefiniertheit der Fluß-Dichte-Beziehung nur in einem statistischen Sinne erfüllt ist; in Abschnitt 4.4 ist bereits geschildert worden, wie stark einzelne Systeme vom mittleren Verhalten abweichen können. Beide Einschränkungen haben zur Folge, daß die Theorie kinematischer Wellen in Strenge nur für Zeiten groß gegen die typische Transientenzeit gilt und dies auch nur unter der Voraussetzung, daß die statistische Abweichung vom Mittel und „diffusive Effekte“ durch Transienten klein gegen die Welleneffekte sind.⁹ Als weitere Folge muß man erwarten, daß ein Fundamentaldiagramm, das dynamisch an den verschiedenen dichten Sektionen eines axial inhomogenen Flusses gemessen wird, von den in den vorigen Abschnitten an axial homogenen Flüssen stationär gemessenen Fundamentaldiagrammen abweicht. Um einen Eindruck zu gewinnen, wie groß diese Abweichung sein kann, führen wir TD-Simulationen an Systemen durch, die den Abb. 5.14 zugrundeliegenden Systemen sehr ähnlich sind (also wiederum $W = 6$, $\mu = 0.5$), nur daß die Rohrlänge hier sehr groß gewählt ist ($L = 300$ statt $L = 9$). In diesen Systemen können sich axiale Dichteinhomogenitäten bilden und frei ausbreiten.

Die Zeitentwicklung der Dichteinhomogenitäten läßt sich in einem Raum-Zeit-Diagramm

⁸ Aus den Ergebnissen von Kapitel 4 ergibt sich aber, daß die Fundamentaldiagramme für granularen Rohrfluß bei geringer Dichte eine $\eta^{3/2}$ -Abhängigkeit aufweisen, während Fundamentaldiagramme von Verkehrsfluß dort eine lineare Abhängigkeit von der Dichte zeigen.

⁹ Darüber hinaus müssen die Welleneffekte natürlich auch groß gegen die Dichteänderungen sein, die sich aus der Tendenz zum Ausbilden der Mikrostruktur ergeben.

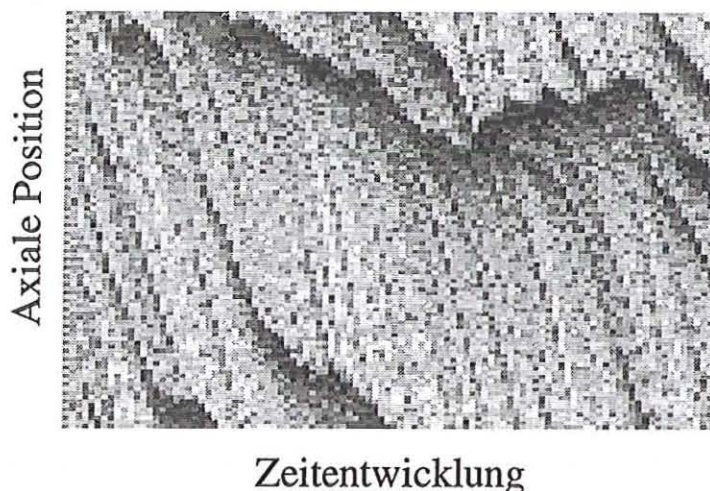


Abbildung 5.15: Raum-Zeit-Diagramm der lokalen Dichte für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.35$, die inneren Parameter $e_n = 0.1$ und $\mu = 0.5$.

darstellen (Abb. 5.15), dessen Erzeugung im folgenden kurz beschrieben sei. Das Rohr wird axial in Sektoren zerlegt (hier 100 Sektoren der Länge $3d$), in denen man in regelmäßigen Zeitabständen (hier alle $2\sqrt{d/g}$) die lokale Dichte mißt. Jeder Sektor bekommt eine Graustufe entsprechend seiner Dichte, wobei Schwarz der während eines Laufs gemessenen maximalen Sektorendichte und Weiß der minimalen Sektorendichte entspricht. Das derart entstandene Dichtemuster wird nun entlang der Abszisse zu den verschiedenen Zeiten dargestellt, wobei der Startzeitpunkt unter homogenen Anfangsbedingungen ganz links und das Ende ganz rechts liegt. Entlang der Ordinate laufen die Positionen der Sektoren im Rohr, wobei die Schwerkraft und also die Fließgeschwindigkeit nach unten zeigen (man beachte die Anwendung von periodischen Randbedingungen). In Abb. 5.15 erkennt man nun, wie sich während des Laufes aus den homogenen Anfangsbedingungen Regionen unterschiedlicher Dichte ausbilden. Diese bewegen sich zum Teil mit der Fließrichtung, zum Teil entgegen der Fließrichtung, abhängig von der jeweiligen lokalen Dichte. Die globale Packungsdichte war in diesem Lauf $\eta = 0.35$, so daß sich hauptsächlich Regionen von einer lokalen Dichte links des Maximums in Abb. 5.14 ausbilden können, die sich gemäß (5.4) in Richtung der mittleren Fließgeschwindigkeit ausbreiten. Beim Zusammentreffen zweier Wellen hoher Dichte (rechts oben in Abb. 5.15) kann aber die lokale Dichte derart ansteigen, daß sie rechts des Maximums von Abb. 5.14 liegt und die entstehende kinematische Welle rückwärts läuft, ein von Staubbildung auf Autobahnen her hinreichend bekanntes Phänomen. Die langen, schmalen und recht steilen Linien, die sich an mehreren Stellen in Abb. 5.15, vor allem aber zu Beginn der Simulation beobachten lassen, bewegen sich in guter Näherung mit der mittleren Fließgeschwindigkeit.

Das aus diesem Lauf gewonnene dynamische Fundamentaldiagramm ist in Abb. 5.16 dargestellt. Zur Bestimmung dieses Diagramms wird wie für das Raum-Zeit-Diagramm der Dichte das Rohr in Sektoren geteilt. Im stationären Zustand (der auch hier dadurch definiert ist, daß die mittlere Axialgeschwindigkeit $v(t)$ nur noch um einen stationären Wert

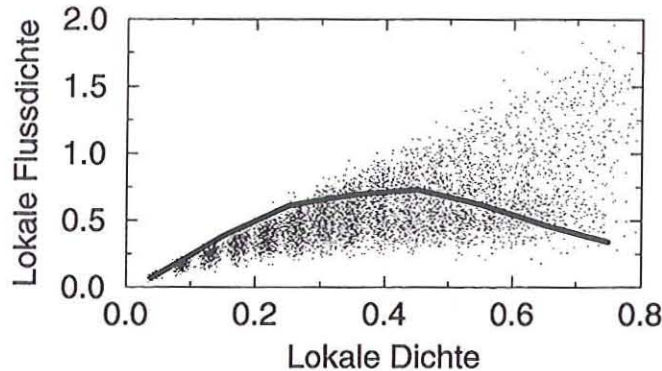


Abbildung 5.16: *Dynamisches Fundamentaldiagramm für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.35$, die inneren Parameter $e_n = 0.1$ und $\mu = 0.5$. Zum Vergleich ist das entsprechende stationäre Fundamentaldiagramm aus Abb. 5.14 als fette Linie miteingetragen.*

v_s fluktuiert) werden zu verschiedenen Zeiten die lokalen Dichten und die lokalen Flußdichten in den Sektoren bestimmt. Jedes gemessene Paar markiert einen Punkt im dynamischen Fundamentaldiagramm. Auf eine Mittelung wird hier verzichtet, zum einen weil auch reale Fundamentaldiagramme, die beispielsweise auf Autobahnen gemessen werden, üblicherweise in dieser Form publiziert werden, zum anderen weil nur die ungemittelte Darstellung die volle Information über die dynamisch gefundenen Korrelationen zwischen lokaler Dichte und lokaler Flußdichte gibt. Welche lokalen Dichten überhaupt vorkommen, hängt natürlich von der jeweiligen globalen Dichte ab; bei mittleren globalen Dichten wie $\eta = 0.35$ ist zu erwarten, daß lokale Dichten in weiten Bereichen des überhaupt möglichen auftreten. Dies bestätigt sich in Abb. 5.16.¹⁰ Die gefundenen Korrelationen streuen hier umso mehr, je höher die lokale Dichte ist, und bei den höchsten lokalen Dichten reicht das Spektrum von Sektoren, die nahezu ungehindert mit etwa der mittleren Fließgeschwindigkeit fallen, bis zu Sektoren, die eine Flußdichte aufweisen, wie sie sich aus der stationären Messung ergibt. Die Abweichungen des dynamischen vom stationären Fundamentaldiagramm sind also beträchtlich; dennoch gibt die Theorie der kinematischen Wellen auf Basis des stationären Fundamentaldiagramms ein qualitativ richtiges Bild für die beobachteten Dichtewellen.

Bei der den Abbildungen 5.15 und 5.16 zugrundeliegenden Simulation sind sehr inelastische Teilchen verwendet worden. Werden die Teilchen immer elastischer, findet man ab einem Restitutionskoeffizienten von $e_n \gtrsim 0.6$ während der simulierten Zeit keine Dichtewellen mehr. Das entsprechende dynamische Fundamentaldiagramm hat dann eine Form wie in Abb. 5.17 gezeigt; es stimmt mit Ausnahme der höchsten gefundenen lokalen Dichten mit dem stationären Fundamentaldiagramm überein. Die lokale Flußdichte ist in sehr guter Näherung eine lineare Funktion der lokalen Dichte. Daraus folgt, daß die Fließge-

¹⁰Die niedrigen Dichten sind in Abb. 5.16 diskontinuierlich vertreten, weil bei den geringen lokalen Dichten jeweils nur wenige Teilchen in einem Sektor sind. Daß die Diskontinuitäten ausgewaschen sind, liegt an der Polydispersität der Teilchen.

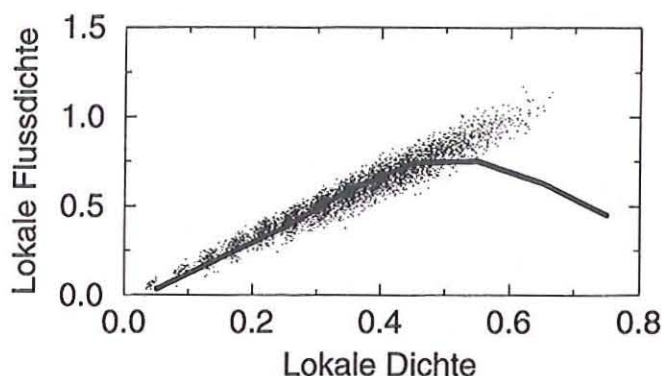


Abbildung 5.17: *Dynamisches Fundamentaldiagramm für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.35$, die inneren Parameter $e_n = 0.6$ und $\mu = 0.5$. Zum Vergleich ist das entsprechende stationäre Fundamentaldiagramm aus Abb. 5.14 als fette Linie miteingetragen.*

schwindigkeit v nicht von der Dichte abhängt; dementsprechend kann es in diesem System keine Dichtewellen geben. Es ist aber zu erwarten, daß bei Erhöhung der globalen Dichte mehr Sektoren längere Zeit eine hohe lokale Dichte aufweisen; sie werden dann im Schnitt auch langsamer sein, das dynamische Fundamentaldiagramm wird bei den hohen Dichten nach unten abknicken, und es werden Dichtewellen auftreten.

5.5.3 Globales Fundamentaldiagramm

In axial inhomogenen Flüssen ist nicht nur das lokale (ob nun stationäre oder dynamische) Fundamentaldiagramm von Interesse, das die Existenz und Form von Dichtewellen bestimmt, sondern auch das globale Fließverhalten, das sich durch diese Dichtewellen, also die „axiale Selbstorganisation“ des Systems, ergibt. Dieses läßt sich in Form der globalen Fundamentaldiagramme darstellen, also durch eine Auftragung der Gesamtflußdichte $\Phi = v_s \eta / W$ gegen die mittlere Dichte η . Da die Simulationen in den langen Rohren aufgrund der hohen Teilchenzahl sehr aufwendig sind, können diese Untersuchungen allerdings nicht so extensiv wie in den Abschnitten 5.3 und 5.4 vorgenommen werden.

In Abb. 5.18 ist das globale Fundamentaldiagramm eines Beispielsystems mit $W = 6$, $e_n = 0.4$, $\mu = 0.5$ mit dem entsprechenden lokalen Fundamentaldiagramm verglichen. Bis zur Dichte $\eta = 0.25$ stimmen beide Fundamentaldiagramme sehr gut überein, darüber ergeben sich Abweichungen: Das lange System ist langsamer. Dies ist eine Folge der sich ausbildenden Dichtewellen, die im langen System erstmals bei $\eta = 0.35$ beobachtet werden (siehe das entsprechende Raum-Zeit-Diagramm der Dichte, Abb. 5.19). Das System nutzt seine axiale Freiheit zum Ausbilden dichter Zonen, die sich entsprechend dem lokalen Fundamentaldiagramm langsamer ausbreiten, was den Fluß insgesamt erniedrigt.

Weiteres Erhöhen der mittleren Dichte über $\eta = 0.35$ hinaus sorgt für eine Zunahme der Dichtewellen im System. Nach Gleichung (5.4) dürfte ab einer Dichte von etwa $\eta = 0.45$,

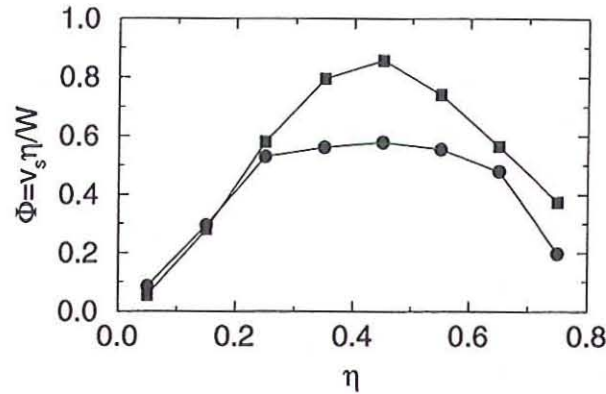


Abbildung 5.18: Globales Fundamentaldiagramm (volle Kreise) für Simulationen in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die inneren Parameter sind $e_n = 0.4$ und $\mu = 0.5$. Das entsprechende lokale Fundamentaldiagramm aus Abb. 5.14 ist zum Vergleich mit dargestellt (volle Quadrate).

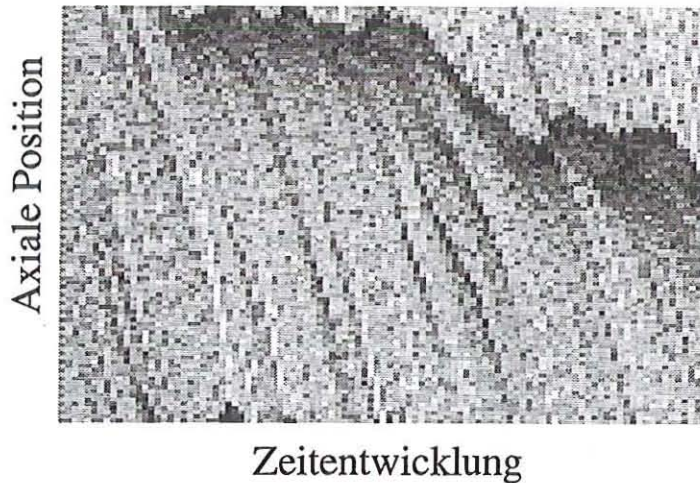


Abbildung 5.19: Raum-Zeit-Diagramm der lokalen Dichte für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.35$, die inneren Parameter $e_n = 0.4$ und $\mu = 0.5$.

wo sich das Maximum des lokalen Fundamentaldiagramms befindet, erstmals mit dem Auftreten von größeren rückwärtslaufenden Dichtewellen zu rechnen sein, wobei aber auch vorwärtslaufende Dichtewellen noch vorhanden sein müssen. Dies ist in der Tat zu beobachten, wie Abb. 5.20 beweist. Bei noch höheren Dichten überwiegen die rückwärtslaufenden Dichtewellen dann bei weitem (Abb. 5.21), bis bei $\eta = 0.75$ der Fluß aufgrund der geometrischen Zwänge wieder nahezu homogen wird.

Als letztes soll geklärt werden, wie sich die Teilcheninelastizität auf das globale Fließver-



Abbildung 5.20: Raum-Zeit-Diagramm der lokalen Dichte für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.45$, die inneren Parameter $e_n = 0.4$ und $\mu = 0.5$.



Abbildung 5.21: Raum-Zeit-Diagramm der lokalen Dichte für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.55$, die inneren Parameter $e_n = 0.4$ und $\mu = 0.5$.

halten auswirkt. Hierzu wird für Simulationen in einem langen Rohr ($W = 6$, $L = 300$, $\mu = 0.5$, $\eta = 0.35$) die mittlere Axialgeschwindigkeit im stationären Zustand gemessen, gegen den Restitutionskoeffizienten aufgetragen und mit dem entsprechenden Verhalten in einem kurzen Rohr ($L = 9$) verglichen (Abb. 5.22). Es zeigt sich, daß lokales und globales Verhalten für elastische Teilchen ($e_n \gtrsim 0.5$) sehr gut übereinstimmen. Den entsprechenden Raum-Zeit-Diagrammen der lokalen Dichte läßt sich entnehmen, daß in diesem Bereich im langen Rohr keine Dichtewellen zu beobachten sind. Diese setzen erst bei $e_n = 0.5$

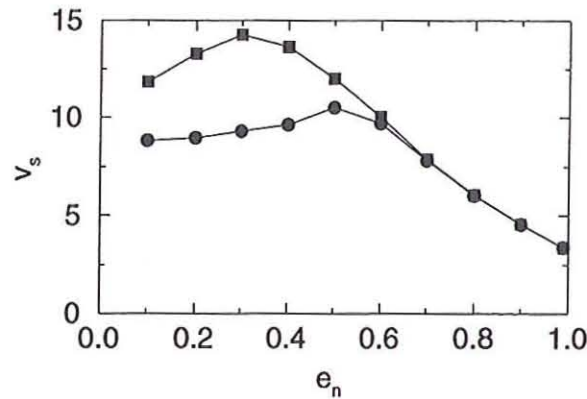


Abbildung 5.22: v_s als Funktion des Restitutionskoeffizienten e_n in einem System der Breite $W = 6$ und Länge $L = 300$ (volle Kreise); die globale Dichte ist $\eta = 0.35$, der Reibungskoeffizient $\mu = 0.5$. Zum Vergleich ist das entsprechende Verhalten im kurzen Rohr (Abb. 5.11) miteingetragen (volle Quadrate).

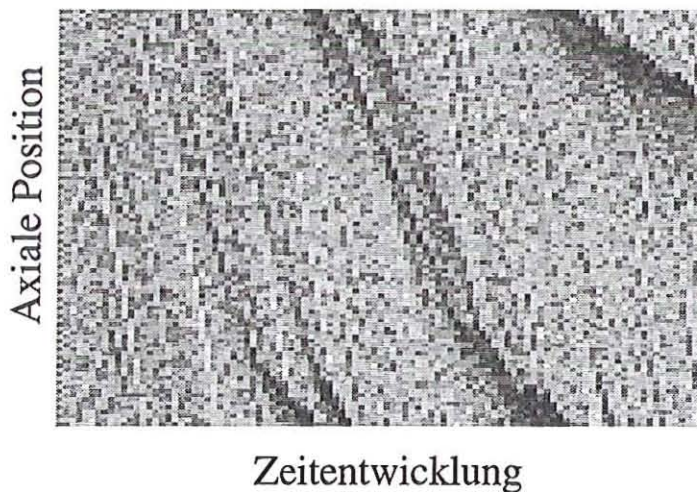


Abbildung 5.23: Raum-Zeit-Diagramm der lokalen Dichte für einen Lauf in einem Rohr der Maße $W = 6$, $L = 300$; die globale Dichte ist $\eta = 0.35$, die inneren Parameter $e_n = 0.5$ und $\mu = 0.5$.

ein (Abb. 5.23) und werden bei fallendem e_n immer prominenter (vgl. auch Abb. 5.15 für das „inelastische Ende“ dieser Entwicklung). Liegen Dichtewellen vor, ist das lange System immer langsamer als das kurze. Das plötzliche Einsetzen der Dichtewellen bei einer bestimmten Teilcheninelastizität läßt sich durch die Konkurrenz zweier Mechanismen interpretieren: Die Rauigkeit der Wand erzeugt granulare Temperatur, welche für starke Selbstdiffusion der Teilchen und daher Homogenität sorgt. Die dissipative Kühlung dagegen vernichtet granulare Temperatur, bewirkt eine Tendenz der Teilchen zur Bildung von Regionen hoher Dichte und verringert auch die Rate der Teilchen-Wand-Kollisionen. Bei

starker Inelastizität der Teilchen gewinnt letzterer Prozess die Oberhand, und Dichtewellen bilden sich aus.

5.5.4 Diskussion

Abschließend stellt sich die Frage, unter welchen Umständen man beim Rohrfluß granularer Medien ein konvexes lokales Fundamentaldiagramm und also Dichtewellen erwarten kann. Einen Teil der Antwort kann man den vorangegangenen Abschnitten unmittelbar entnehmen: Globale Dichte und Teilcheninelastizität müssen hoch genug sein. Darüber hinaus spielt aber auch die Geometrie eine Rolle. Je geringer die Rohrbreite ist, desto kürzer sind die Transientenzeiten, und desto geringer die Wahrscheinlichkeit, einen „unterkühlten“ Zustand wie bei den hohen lokalen Dichten in Abb. 5.17 zu erhalten. Weiterhin gibt es in den breiten Rohren eine relativ starke radiale Selbstorganisation (Abschnitt 5.2), die mit der axialen Selbstorganisation konkurriert und sie möglicherweise außer bei den sehr geringen Packungsdichten unterdrücken könnte. Die Länge der Rohre ist, wie mehrfach angesprochen, ebenfalls von Bedeutung, indem in kurzen Rohren die Bildung von Dichtewellen unterdrückt ist (vgl. die entsprechenden Passagen und Zitate aus Abschnitt 4.1.1). Im Rahmen dieser Arbeit war es leider nicht mehr möglich, eine systematische Untersuchung des Einflusses der Rohrlänge vorzunehmen. Die hier präsentierten Simulationen zu Dichtewellen in langen Rohren sind daher nur als Illustration der besprochenen Prinzipien zu verstehen, da einzelne Ergebnisse möglicherweise noch von der Rohrlänge oder aber von der simulierten Zeit abhängen könnten (beispielsweise ist es denkbar, daß der Bildung von Dichtewellen ein „Nukleationsprozess“ zugrundeliegt, der dann natürlich auf längeren Orts- oder Zeitskalen mit größerer Wahrscheinlichkeit beobachtet wird).

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wird der Rohrfluß granularer Materie am Beispiel einer zweidimensionalen Geometrie mit rauen Rohrwänden untersucht.

Das erste Kapitel bietet einen ausführlichen Überblick über die Phänomenologie fließender granularer Materie sowie die theoretischen Bemühungen zu ihrem Verständnis auf makroskopischer und mikroskopischer Ebene.

Im zweiten Kapitel wird in knapper Form über die Eigenschaften und auch Probleme der beiden in der Arbeit verwendeten Simulationsverfahren berichtet. Unter anderem wird der zuvor nicht bekannte Effekt des *Bremsversagens* beschrieben, der bei der zeitschrittgesteuerten Molekulardynamik-Simulation streifender Kollisionen wichtig ist.

Die methodischen Fragen zur zeitschrittgesteuerten Molekulardynamik-Simulation werden im dritten Kapitel vertieft. Dort wird erstmals eine umfassende Diskussion der verschiedenen in der Literatur verwendeten Kraftgesetze gegeben. Diese werden insbesondere im Hinblick auf ihre Kollisionseigenschaften untersucht, die im Rahmen dieser Arbeit von besonderem Interesse sind. Um den Vergleich mit experimentellen Ergebnissen zu ermöglichen, werden die entsprechenden Simulationen in einem dimensionsbehafteten Einheitensystem durchgeführt (SI-Einheiten). Darüber hinaus wird gezeigt, wie aus dem Bremsversagen-Effekt bei streifendem Einfall einzelner Teilchen auf eine raue Wand letztlich ein zweiter Effekt resultiert, den wir *Notbremse* nennen.

Das vierte Kapitel befaßt sich mit einer theoretischen Betrachtung des granularen Rohrflusses, die im Gegensatz zu Kontinuumstheorien globale Bilanzgleichungen für Axialgeschwindigkeit und „thermische“ (stochastische) Geschwindigkeit aufstellt. Das macht es möglich, explizite Abhängigkeiten beispielsweise der mittleren Axialgeschwindigkeit im stationären Zustand von äußeren Parametern wie Rohrbreite und Packungsdichte anzugeben. Diese werden im Gültigkeitsbereich der einfachen Theorie durch dimensionslose Simulationen bestätigt. Es wird auf Basis der einfachen Theorie gezeigt, daß Bagnolds Stoffgesetz auch dann noch gilt, wenn die thermische Geschwindigkeit der Teilchen für die internen Kollisionsraten von Bedeutung ist. Die einfache Theorie gestattet weiterhin die Vorhersage von Transienten, die in sehr guter Übereinstimmung mit Simulationsergebnissen sind.

Im fünften Kapitel wird gezeigt, wie der kombinierte Effekt von Bremsversagen und Notbremse zu Bistabilität in simulierten granularen Flüssen führen kann. In Bereichen, wo dieses Artefakt nicht zu fürchten ist, werden Simulationen zur Aufklärung des Fließverhaltens stark inhomogener granularer Flüsse verwendet. Das Kapitel schließt mit der er-

sten systematischen Diskussion der Dichtewellen, die sich in granularen Flüssen auf großen Längenskalen beobachten lassen.

Für die Zukunft bietet es sich an, die Eigenschaften dichter Systeme näher zu untersuchen sowie zu klären, ob und in welcher Form es einen Konkurrenzprozess zwischen radialer und axialer Selbstorganisation bei breiten und langen Rohren gibt. Der Einfluß von statischer Aufladung (Triboelektrifikation) auf die Fließeigenschaften und insbesondere auf die selbstorganisierten Strukturen ist eine hochinteressante Fragestellung, die leider im Rahmen dieser Arbeit nur angeschnitten werden konnte. Es ist ebenfalls denkbar, den Spannungstensor in zukünftigen Programmversionen direkt am Fluß zu messen und mit theoretischen Vorhersagen, die sich aus einer Erweiterung der einfachen Theorie zum inhomogenen Fall hin ergeben könnten, zu vergleichen.

Literaturverzeichnis

- [1] W. Reisner, M. v. Eisenhart Rothe, *Silos und Bunker für die Schüttgutspeicherung*, Clausthal-Zellerfeld 1971 (TransTech).
- [2] R. M. Nedderman, *Statics and Kinematics of Granular Materials*, Cambridge 1992 (Cambr. Univ. Press).
- [3] A. E. Scheidegger, *Physical Aspects of Natural Catastrophes*, Amsterdam 1975.
- [4] T. G. Drake, Discrete-particle models for sediment transport processes, Vortrag auf dem NATO ASI „Mobile Particulate Systems“, Juli 1994, Cargèse, Frankreich.
- [5] S. B. Savage, Gravity flow of cohesionless granular materials in chutes and channels, *J. Fluid Mech.* **92**, 53 (1979).
- [6] T. G. Drake, Structural features in granular flows, *J. Geophys. Res.* **95**, 8681 (1990).
- [7] V. V. R. Natarajan, M. L. Hunt, E. D. Taylor, Local measurements of velocity fluctuations and diffusion coefficients for a granular material flow, *J. Fluid Mech.* **304**, 1 (1995).
- [8] O. Pouliquen, R. Gutfraind, Stress fluctuations and shear zones in quasi-static granular chute flows, *Phys. Rev. E*, eingesandt.
- [9] O. Reynolds, On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact, *Philos. Mag. Ser. 5* **20**, 469 (1885).
- [10] G. Y. Onoda, E. G. Liniger, Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2727 (1990).
- [11] C. F. Jenkin, The pressure exerted by granular material: An application of the principle of dilatancy, *Proc. Roy. Soc. A* **131**, 53 (1931).
- [12] H. Brauer, *Grundlagen der Einphasen- und Mehrphasenströmung*, Aarau 1971 (Sauerländer Verlag)
- [13] L. M. Connelly, Wall-pressure and material-velocity measurements for the flow of granular material under plane-strain conditions, in: *Mechanics Applied to the Transport of Bulk Materials*, S. C. Cowin (Hrsg.), New York 1979 (Am. Soc. Mech. Eng.).
- [14] G. Hagen, Über den Druck und die Bewegung des trocknen Sandes, *Berlin Monatsber. Akad. Wiss.* 1852, 35.

- [15] H. A. Janssen, Versuche über Getreidedruck in Silozellen, Zeitschr. VDI **39**, 1045 (1895).
- [16] S. C. Cowin, A theory for static loads in bins, J. Appl. Mech. **44**, 409 (1977).
- [17] K. Wieghardt, Experiments in granular flow, Ann. Rev. Fluid Mech. **7**, 89 (1975).
- [18] C. D. Spink, R. M. Nedderman, Gravity discharge rate of fine particles from hoppers, Powder Technol. **21**, 245 (1978).
- [19] R. M. Nedderman, U. Tüzün, S. B. Savage, G. T. Houlsby, The flow of granular materials – I: Discharge rate from hoppers, Chem. Eng. Sci. **37**, 1597 (1982).
- [20] E. G. Wolf, H. L. v. Hohenleiten, Experimental study of the flow of coal in chutes at Riverside generating station, Trans. ASME **67**, 585 (1945).
- [21] J. Eibl, Design of silos – pressures and explosions, The Structural Engineer **62A**, 169 (1984).
- [22] M. P. Luong, Flow characteristics of granular bulk materials, Part. Part. Syst. Character. **10**, 79 (1993).
- [23] J. F. Davidson, Bubbles in fluidized beds, in: *Mobile Particulate Systems*, E. Guazzelli, L. Oger (Hrsg.), Dordrecht 1995 (Kluwer).
- [24] J. R. Howard, *Fluidized Bed Technology – Principles and Applications*, Bristol 1989 (Adam Hilger).
- [25] S. Ogawa, Multitemperature theory of granular materials, in: *Proc. US-Japan Seminar on Continuum-Mechanical and Statistical Approaches in the Mechanics of Granular Materials*, S. C. Cowin u. M. Satake (Hrsg.), Tokyo 1978 (Gakujutsu Bunken Fukyukai).
- [26] H. Sauerteig, Explosions- und Erstickungsgefahren in Getreidesilos, Deutsche Müller-Zeitung No. 3/1963, 49.
- [27] W.-F. Chen, A. F. Saleeb, *Constitutive Equations for Engineering Materials*, Vol. 1 (Elasticity and Modeling), Amsterdam 1994² (Elsevier).
- [28] G. Rátkai, Particle flow and mixing in vertically vibrated beds, Powder Technol. **15**, 187 (1976).
- [29] C. Laroche, S. Douady, S. Fauve, Convective flow of granular masses under vertical vibrations, J. Phys. France **50**, 679 (1989).
- [30] P. Evesque, J. Rajchenbach, Instability in a sand heap, Phys. Rev. Lett. **62**, 44 (1989).
- [31] P. Evesque, E. Szmatala, J.-P. Denis, Surface fluidization of a sand pile, Europhys. Lett. **12**, 623 (1990).
- [32] E. Clément, J. Rajchenbach, Fluidization of a bidimensional powder, Europhys. Lett. **16**, 133 (1991).

- [33] J. Rajchenbach, Dilatant process for convective motion in a sand heap, *Europhys. Lett.* **16**, 149 (1991).
- [34] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann, S. Sokolowski, Convection cells in vibrating granular media, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1371 (1992).
- [35] Y.-h. Taguchi, New origin of a convective motion: Elastically induced convection in granular materials, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1367 (1992).
- [36] S. Warr, J. M. Huntley, G. T. H. Jacques, Fluidization of a two-dimensional granular system: Experimental study and scaling behavior, *Phys. Rev. E* **52**, 5583 (1995).
- [37] M. A. Hopkins, M. Y. Louge, Inelastic microstructure in rapid granular flows of smooth disks, *Phys. Fluids A* **3**, 47 (1991).
- [38] B. E. Sanders, N. L. Ackermann, Microstructure in rapid gravity driven channel flow, in: *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, H. H. Shen *et al.* (Hrsg.), Amsterdam 1992 (Elsevier).
- [39] S. B. Savage, Instability of unbounded uniform granular shear flow, *J. Fluid Mech.* **241**, 109 (1992).
- [40] M. Babić, Particle clustering: An instability of rapid granular flows, in: *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, H. H. Shen *et al.* (Hrsg.), Amsterdam 1992 (Elsevier).
- [41] M. Babić, On the stability of rapid granular flows, *J. Fluid Mech.* **254**, 127 (1993).
- [42] M. Babić, Gravity-driven flows of smooth, inelastic disks between parallel bumpy boundaries, *J. Appl. Mech.* **60**, 59 (1993).
- [43] I. Goldhirsch, G. Zanetti, Clustering instability in dissipative gases, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1619 (1993).
- [44] S. McNamara, W. R. Young, Inelastic collapse in two dimensions, *Phys. Rev. E* **50**, R28 (1994).
- [45] P. J. Schmid, H. K. Kytömaa, Transient and asymptotic stability of granular shear flow, *J. Fluid Mech.* **264**, 255 (1994).
- [46] C.-H. Wang, R. Jackson, S. Sundaresan, Stability of bounded and unbounded rapid shear flows of a granular material, *J. Fluid Mech.*, eingesandt.
- [47] I. Goldhirsch, Microstructures and kinetics in rapid granular flows, in: *Traffic and Granular Flow*, D. E. Wolf *et al.* (Hrsg.), Singapur 1996 (World Scientific).
- [48] P. K. Haff, Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon, *J. Fluid Mech.* **134**, 401 (1983).
- [49] P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld, Self-organized criticality: An explanation of $1/f$ noise, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- [50] G. A. Held, D. H. Solina II, D. T. Keane, W. J. Haag, P. M. Horn, G. Grinstein, Experimental study of critical mass fluctuations in an evolving sandpile, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1120 (1990).

- [51] H. M. Jaeger, C.-H. Liu, S. R. Nagel, Relaxation at the angle of repose, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 40 (1989).
- [52] P. Evesque, Analysis of the statistics of sandpile avalanches using soil mechanics results and concepts, *Phys. Rev. A* **43**, 2720 (1991).
- [53] J. Rosendahl, M. Vekić, J. Kelley, Persistent self-organization of sandpiles, *Phys. Rev. E* **47**, 1401 (1993).
- [54] D. M. Hanes, D. L. Inman, Observations of rapidly flowing granular-fluid materials, *J. Fluid Mech.* **150**, 357 (1985).
- [55] D. M. Hanes, J. T. Jenkins, M. W. Richman, The thickness of steady plane shear flows of circular disks driven by identical boundaries, *J. Appl. Mech.* **55**, 969 (1988).
- [56] R. M. Nedderman, C. Laohakul, The thickness of the shear zone in flowing granular materials, *Powder Technol.* **25**, 91 (1980).
- [57] J. Bridgwater, On the width of failure zones, *Géotechnique* **30**, 533 (1980).
- [58] H.-B. Mühlhaus, I. Vardoulakis, The thickness of shear bands in granular materials, *Géotechnique* **37**, 271 (1987).
- [59] J. P. Bardet, J. Proubet, Shear-band analysis in idealized granular material, *J. Eng. Mech.* **118**, 397 (1992).
- [60] S. B. Savage, S. McKeown, Shear stresses developed during rapid shear of dense concentrations of large spherical particles between concentric cylinders, *J. Fluid Mech.* **127**, 453 (1983).
- [61] S. B. Savage, M. Sayed, Stresses developed by dry cohesionless granular materials sheared in an annular shear cell, *J. Fluid Mech.* **142**, 391 (1984).
- [62] O. Hungr, N. R. Morgenstern, High velocity ring shear tests on sand, *Géotechnique* **34**, 4125 (1984).
- [63] W. Reisner, The behaviour of granular materials in flow out of hoppers, *Powder Technol.* **1**, 257 (1967).
- [64] A. E. Scheidegger, On the prediction of the reach and velocity of catastrophic landslides, *Rock Mech.* **5**, 231 (1973).
- [65] H. J. Melosh, The physics of very large landslides, *Acta Mech.* **64**, 89 (1986).
- [66] K. Hutter, K. R. Rajagopal, On flows of granular materials, *Continuum Mech. Thermodyn.* **6**, 81 (1994).
- [67] K. Howard, Avalanche mode of motion: Implications from lunar examples, *Science* **180**, 1052 (1973).
- [68] J. C. Williams, The segregation of particulate materials. A review, *Powder Technol.* **15**, 245 (1976).
- [69] M. H. Cooke, D. J. Stephens, J. Bridgwater, Powder mixing – a literature survey, *Powder Technol.* **15**, 1 (1976).

- [70] H. Matthée, Segregation phenomena relating to bunkering of bulk materials: Theoretical considerations and experimental investigations, *Powder Technol.* **1**, 265 (1967).
- [71] F. Cantelaube, Y. Limon Duparcmeur, D. Bideau, G. H. Ristow, Geometrical analysis of avalanches in a 2d drum, *J. Phys. I (France)* **5**, 581 (1995).
- [72] O. Zik, D. Levine, S. G. Lipson, S. Shtrikman, J. Stavans, Rotationally induced segregation of granular materials, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 5 (1994).
- [73] K. M. Hill, J. Kakalios, Reversible axial segregation of rotating granular media, *Phys. Rev. E* **52**, 4393 (1995).
- [74] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz, R. H. Swendsen, Why the brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1038 (1987).
- [75] R. Jullien, P. Meakin, A. Pavlovitch, Three-dimensional model for particle-size segregation by shaking, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 640 (1992).
- [76] J. Duran, J. Rajchenbach, E. Clément, Arching effect model for particle size segregation, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2431 (1993).
- [77] S. Dippel, S. Luding, Simulations on size segregation: Geometrical effects in the absence of convection, *J. Phys. I (France)* **5**, 1527 (1995).
- [78] J. B. Knight, H. M. Jaeger, S. R. Nagel, Vibration-induced size separation in granular media: The convection connection, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3728 (1993).
- [79] J. Duran, T. Mazozi, E. Clément, J. Rajchenbach: Decompaction modes of a two-dimensional "sandpile" under vibration: Model and experiments, *Phys. Rev. E* **50**, 3092 (1994).
- [80] W. Cooke, S. Warr, J. M. Huntley, R. C. Ball, Particle size segregation in a two-dimensional bed undergoing vertical vibration, *Phys. Rev. E*, eingesandt.
- [81] T. Pöschel, H. J. Herrmann, Size segregation and convection, *Europhys. Lett.* **29**, 123 (1995).
- [82] E. Clément, J. Duran, J. Rajchenbach Experimental study of heaping in a two-dimensional "sandpile", *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1189 (1992).
- [83] R. A. Bagnold, *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes*, London 1956 (Chapman and Hall).
- [84] R. A. Bagnold, The shearing and dilatation of dry sand and the "singing" mechanism, *Proc. Roy. Soc. A* **295**, 219 (1966).
- [85] J. Tejchman, G. Gudehus, Silo music and silo-quake experiments and a numerical Cosserat approach, *Powder Technol.* **76**, 201 (1993).
- [86] K. Liffman, D. Y. C. Chan, B. D. Hughes, On the stress depression under a sandpile, *Powder Technol.* **78**, 263 (1993).
- [87] F. Melo, P. Umbanhowar, H. L. Swinney, Transition to parametric wave patterns in a vertically oscillated granular layer, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 172 (1994).

- [88] W. Landry, B. T. Werner, Computer simulations of self-organized wind ripple patterns, *Physica D* **77**, 238 (1994).
- [89] K. Pye, H. Tsoar, *Aeolian Sand and Desert Dunes*, London 1990 (Unwin Hyman).
- [90] D. F. Bagster, J. Bridgwater, The measurement of the force needed to move blades through a bed of cohesionless granules, *Powder Technol.* **1**, 189 (1967).
- [91] R. A. Bagnold, Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a Newtonian fluid under shear, *Proc. Roy. Soc. A* **225**, 49 (1954).
- [92] R. A. Bagnold, The flow of cohesionless grains in fluids, *Phil. Transactions A* **249**, 235 (1956).
- [93] A. W. Jenike, Gravity flow of solids, in: *Inst. Chem. Engrs. Symp. on Handling of Solids*, London 1962.
- [94] Pariseau, Nicholson, in: *Mechanics Applied to the Transport of Bulk Materials*, S. C. Cowin (Hrsg.), New York 1979 (Am. Soc. Mech. Eng.).
- [95] F. Radjai, S. Roux, Friction-induced self-organization of a one-dimensional array of particles, *Phys. Rev. E* **51**, 6177 (1995).
- [96] F. Radjai, P. Evesque, D. Bideau, S. Roux, Stick-slip dynamics of a one-dimensional array of particles, *Phys. Rev. E* **52**, 5555 (1995).
- [97] F. Radjai, L. Brendel, S. Roux, Non-smoothness, indeterminacy and friction in granular systems, *Phys. Rev. E*, erscheint 1996.
- [98] S. B. Savage, The mechanics of rapid granular flows, *Adv. Appl. Mech.* **24**, 289 (1984).
- [99] A. Krawietz, *Materialtheorie – Mathematische Beschreibung des phänomenologischen thermomechanischen Verhaltens*, Berlin 1986 (Springer).
- [100] M. A. Goodman, S. C. Cowin, Two problems in the gravity flow of granular materials, *J. Fluid Mech.* **45**, 321 (1971).
- [101] S. C. Cowin, A theory for the flow of granular materials, *Powder Technol.* **9**, 61 (1974).
- [102] J. W. Nunziato, S. L. Passman, J. P. Thomas, Jr., Gravitational flows of granular materials with incompressible grains, *J. Rheol.* **24**, 395 (1980).
- [103] D. F. McTigue, A nonlinear constitutive model for granular materials: Application to gravity flow, *J. Appl. Mech.* **49**, 291 (1982).
- [104] K. Hutter, T. Scheiwiler, Rapid plane flow of granular materials down a chute, in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [105] R. Gudhe, R. C. Yalamanchili, Flow of granular material down a vertical pipe, *Int. J. Non-linear Mech.* **29** (1994).

- [106] R. C. Yalamanchili, R. Gudhe, K. R. Rajagopal, Flow of granular materials in a vertical channel under the action of gravity, *Powder Technol.* **81**, 65 (1994).
- [107] J. T. Jenkins, S. C. Cowin, Theories for flowing granular materials, in: *Mechanics Applied to the Transport of Bulk Materials*, S. C. Cowin (Hrsg.), New York 1979 (Am. Soc. Mech. Eng.).
- [108] Z. Mroz, Deformation and flow of granular materials, in: *Proc. 15th Int. Congr. Theor. Appl. Mech.*, F. P. J. Rimrott, B. Tabarrok (Hrsg.).
- [109] A. J. M. Spencer, Deformation of an ideal granular material, in: *Mechanics of Solids, Rodney Hill 60th Anniv. Vol.*, H. G. Hopkins, J. J. Sewell (Hrsg.), Oxford 1981 (Pergamon).
- [110] S. Ogawa, A. Umemura, N. Oshima, On the equations of fully fluidized granular materials, *J. Appl. Math. Phys.* **31**, 483 (1980).
- [111] S. B. Savage, D. J. Jeffrey, The stress tensor in a granular flow at high shear rates, *J. Fluid Mech.* **110**, 255 (1981).
- [112] J. T. Jenkins, S. B. Savage, A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles, *J. Fluid Mech.* **130**, 187 (1983).
- [113] C. K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, N. Chepurnity, Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield, *J. Fluid Mech.* **140**, 223 (1984).
- [114] K. Hui, P. K. Haff, Kinetic grain flow in a vertical channel, *Int. J. Multiphase Flow* **12**, 289 (1986).
- [115] C. K. K. Lun, S. B. Savage, The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular materials, *Acta Mech.* **63**, 15 (1986).
- [116] C. K. K. Lun, S. B. Savage, A simple kinetic theory for granular flow of rough, inelastic, spherical particles, *J. Appl. Mech.* **54**, 47 (1987).
- [117] M. W. Richman, C. S. Chou, Boundary effects on granular shear flows of smooth disks, *J. Appl. Math. Phys. (ZAMP)* **39**, 885 (1988).
- [118] S. B. Savage, Streaming motions in a bed of vibrationally fluidized dry granular material, *J. Fluid Mech.* **194**, 457 (1988).
- [119] P. C. Johnson, P. Nott, R. Jackson, Frictional-collisional equations of motion for particulate flows and their application to chutes, *J. Fluid Mech.* **210**, 501 (1990).
- [120] H. Ahn, C. E. Brennen, R. H. Sabersky, Analysis of the fully developed chute flow of granular materials, *J. Appl. Mech.* **59**, 109 (1992).
- [121] S. Abu-Zaid, G. Ahmadi, Analysis of rapid shear flows of granular materials by a kinetic model including frictional losses, *Powder Technol.* **77**, 7 (1993).
- [122] A. Khelil, J. C. Roth, Gravitational flow behaviour of granular materials, *Eur. J. Mech. B* **13**, 57 (1994).

- [123] A. Goldshtein, M. Shapiro, Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 1: General hydrodynamic equations. *J. Fluid Mech.* **282**, 75 (1995).
- [124] J. Schofield, I. Oppenheim, The hydrodynamics of inelastic granular systems, *Physica A* **196**, 209 (1993).
- [125] P. Zamankhan, Kinetic theory of multicomponent dense mixtures of slightly inelastic spherical particles, *Phys. Rev. E* **52**, 4877 (1995).
- [126] C. S. Campbell, Rapid granular flows, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **22**, 57 (1990).
- [127] S. B. Savage, R. Dai, Some aspects of bounded and unbounded shear flows of granular material, in: *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, H. H. Shen et al. (Hrsg.), 1992 (Elsevier).
- [128] C. S. Campbell, C. E. Brennen, Computer simulation of granular shear flows, *J. Fluid Mech.* **151**, 167 (1985).
- [129] J. T. Jenkins, Boundary conditions for rapid granular flow: Flat, frictional walls, *J. Appl. Mech.* **59**, 120 (1992).
- [130] M. W. Richman, Boundary conditions for granular flows at randomly fluctuating bumpy boundaries, in: *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, H. H. Shen et al. (Hrsg.), 1992 (Elsevier).
- [131] J. F. Carr, D. M. Walker, An annular shear cell for granular materials, *Powder Technol.* **1**, 369 (1967).
- [132] B. Scarlett, R. J. Akers, J. S. Parkinson, A. C. Todd, The application of geometrical probability to particulate systems. Part I. The critical porosity of sheared granular materials, *Powder Technol.* **3**, 299 (1969/1970).
- [133] D. J. Stephens, J. Bridgwater, The mixing and segregation of cohesionless particulate materials. Part I. Failure zone formation. *Powder Technol.* **21**, 17 (1978).
- [134] K. Craig, R. H. Buckholtz, G. Domoto, An experimental study of the rapid flow of dry cohesionless metal powders, *J. Appl. Mech.* **53**, 935 (1986).
- [135] P. C. Johnson, R. Jackson, Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing, *J. Fluid Mech.* **176**, 67 (1987).
- [136] S. B. Savage, Granular flow down rough inclines – review and extension, in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [137] S. P. Timoshenko, J. N. Goodier, *Theory of Elasticity*, New York 1970³ (McGraw-Hill).
- [138] H. G. Hahn, *Elastizitätstheorie*, Stuttgart 1985 (Teubner).
- [139] K. L. Johnson, *Contact Mechanics*, Cambridge 1989 (Cambridge Univ. Press).
- [140] H. Hertz, Über die Berührung fester elastischer Körper, *Journal f. d. reine u. angew. Math.* **92**, 156 (1882).

- [141] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd. VII (Elastizitätstheorie)*, Berlin 1987¹² (Akademie Verlag).
- [142] T. G. Drake, Granular flow: Physical experiments and their implications for microstructural theories, *J. Fluid Mech.* **225**, 121 (1991).
- [143] G. Kuwabara, K. Kono, Restitution coefficient in a collision between two spheres, *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, 1230 (1987).
- [144] K. L. Johnson, K. Kendall, A. D. Roberts, Surface energy and the contact of elastic solids, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **324**, 301 (1971).
- [145] W. J. Stronge, Rigid body collisions with friction, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **431**, 169 (1990).
- [146] C. E. Smith, P.-P. Liu, Coefficients of restitution, *J. Appl. Mech.* **59**, 963 (1992).
- [147] Y. Wang, M. T. Mason, Two-dimensional rigid-body collisions with friction, *J. Appl. Mech.* **59**, 635 (1992).
- [148] W. Goldsmith, *Impact – The Theory and Physical Behaviour of Colliding Solids*, London 1960 (Edward Arnold Publ.).
- [149] J. P. Andrews, *Proc. Phys. Soc.* **43**, 8 (1931).
- [150] Y.-H. Pao, Extension of the Hertz theory of impact to the viscoelastic case, *J. Appl. Phys.* **26**, 1083 (1955).
- [151] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J.-M. Hertzsch, T. Pöschel, The collision of particles in granular systems, *Physica A*, eingesandt.
- [152] C. V. Raman, *Phys. Rev.* **15**, 277 (1920).
- [153] F. G. Bridges, A. Hatzes, D. N. C. Lin, Structure, stability and evolution of Saturn's rings, *Nature* **309**, 333 (1984).
- [154] R. Sondergaard, K. Chaney, C. E. Brennen, Measurements of solid spheres bouncing off flat plates, *J. Appl. Mech.* **57**, 694 (1990).
- [155] T. G. Drake, R. L. Shreve, High-speed motion pictures of nearly steady, uniform, two-dimensional, inertial flows of granular material, *J. Rheol.* **30**, 981 (1986).
- [156] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang, K. Allia, Measurements of the collision properties of small spheres, *Phys. Fluids* **6**, 1108 (1994).
- [157] O. R. Walton, R. L. Braun, Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks, *J. Rheology* **30**, 949 (1986).
- [158] D. Dowson, *History of Tribology*, London 1979 (Longman).
- [159] M. Barquins, La tribologie – la science pour comprendre et maîtriser le frottement et l'usure, *Bull. Assoc. Phys.* **88**, 793-822, 949-972.
- [160] B. N. J. Persson, Theory and simulation of sliding friction, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1212 (1993).

- [161] B. N. J. Persson, Theory of friction and boundary lubrication, *Phys. Rev. B* **48**, 18140 (1993).
- [162] F. Heslot, T. Baumberger, B. Perrin, B. Caroli, C. Caroli, Creep, stick-slip, and dry-friction dynamics: Experiments and a heuristic model, *Phys. Rev. E* **49**, 4973 (1994).
- [163] J. Schmittbuhl, J.-P. Vilotte, S. Roux, Dynamic friction of self-affine surfaces, *J. Phys. II (France)* **4**, 225 (1994).
- [164] T. Pöschel, H. J. Herrmann, A simple geometrical model for solid friction, *Physica A* **198**, 441 (1993).
- [165] R. D. Mindlin, Compliance of elastic bodies in contact, *J. Appl. Mech.* **16**, 259 (1949).
- [166] R. D. Mindlin, H. Deresiewicz, Elastic spheres in contact under varying oblique forces, *J. Appl. Mech.* **20**, 327 (1953).
- [167] N. Maw, J. R. Barber, J. N. Fawcett, The oblique impact of elastic spheres, *Wear* **38**, 101 (1976).
- [168] N. Maw, J. R. Barber, J. N. Fawcett, The role of elastic tangential compliance in oblique impact, *J. Lubr. Technol.* **103**, 74 (1981).
- [169] K. Walton, The oblique compression of two elastic spheres, *J. Mech. Phys. Solids* **26**, 139 (1978).
- [170] U. Tüzün, O. R. Walton, Micromechanical modelling of load-dependent friction in contacts of elastic spheres, *J. Phys. D* **25**, A44 (1992).
- [171] R. L. Munisamy, D. A. Hills, D. Nowell, Static axisymmetric Hertzian contacts subject to shearing forces, *J. Appl. Mech.* **61**, 278 (1994).
- [172] C. T. Lim, W. J. Stronge, Frictional torque and compliance in collinear elastic collisions, *Int. J. Mech. Sci.* **36**, 911 (1994).
- [173] A. D. Lewis, R. J. Rogers, Experimental and numerical study of forces during oblique impact, *J. Sound and Vibration* **125**, 403 (1988).
- [174] K. L. Johnson, The bounce of "superball", *Int. J. Mech. Engng. Education* **111**, 57 (1983).
- [175] O. R. Walton, Granular Solids Flow Project, Quarterly Report, Jan.-March 1988, Lawrence Livermore Nat. Lab., UCID 20297-88-1.
- [176] R. M. Brach, Rigid body collisions, *J. Appl. Mech.* **56**, 133 (1989).
- [177] T. A. J. Duke, G. C. Barker, A. Mehta, A Monte Carlo study of granular relaxation, *Europhys. Lett.* **13**, 19 (1990).
- [178] G. W. Baxter, R. P. Behringer, Cellular automata models of granular flow, *Phys. Rev. A* **42**, 1017 (1990).

- [179] G. Peng, H. J. Herrmann, Density waves of granular flow in a pipe using lattice-gas automata, *Phys. Rev. E* **49**, R1796 (1994).
- [180] A. Károlyi, J. Kertész, Lattice gas simulations of granular media, *Braz. J. Phys.* **24**, 922 (1994).
- [181] E. G. Flekkøy, H. J. Herrmann, Lattice Boltzmann models for complex fluids, *Physica A* **199**, 1 (1993).
- [182] H. Caram, D. C. Hong, Random-walk approach to granular flows, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 828 (1991).
- [183] G. Baumann, I. M. Jánosi, D. E. Wolf, Surface properties and flow of granular material in a two-dimensional rotating-drum model, *Phys. Rev. E* **51**, 1879 (1995)
- [184] J. Schäfer, D. E. Wolf, Bistability in simulated granular flow along corrugated walls, *Phys. Rev. E* **51**, 6154 (1995).
- [185] J. Schäfer, S. Dippel, D. E. Wolf, Force schemes in simulations of granular materials, *J. Phys. I (France)* **6**, 5 (1996).
- [186] G. W. Hawkins, Simulation of granular flow, in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [187] C. S. Campbell, C. E. Brennen, Computer simulation of shear flows of granular material, in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [188] C. S. Campbell, A. Gong, The stress tensor in a two-dimensional granular shear flow, *J. Fluid Mech.* **164**, 107 (1986).
- [189] C. S. Campbell, The stress tensor for simple shear flows of a granular material, *J. Fluid Mech.* **203**, 449 (1989).
- [190] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, J. Duran, Studies of columns of beads under external vibrations *Phys. Rev. E* **49**, 1634 (1994)
- [191] S. Luding, H. J. Herrmann, A. Blumen, J. Rajchenbach, J. Duran, Simulations of two-dimensional arrays of beads under external vibrations: Scaling behavior, *Phys. Rev. E* **50**, 3100 (1994)
- [192] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, J. Duran, Anomalous energy dissipation in molecular-dynamics simulations of grains: The “detachment” effect, *Phys. Rev. E* **50**, 4113 (1994).
- [193] C. K. K. Lun, A. A. Bent, Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow, *J. Fluid Mech.* **258**, 335 (1994).
- [194] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford 1987 (Clarendon).
- [195] B. D. Lubachevsky, How to simulate billiards and similar systems, *J. Comp. Phys.* **94**, 255 (1991).

- [196] S. McNamara, W. R. Young, Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium, *Phys. Fluids A* **4**, 496 (1992).
- [197] E. Clément, S. Luding, A. Blumen, J. Rajchenbach, J. Duran, Fluidization, condensation and clusterization of a vibrating column of beads, *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, 1807 (1993).
- [198] S. Luding, Doktorarbeit, Universität Freiburg (1994).
- [199] A. Rahman, Correlations in the motion of atoms in liquid argon, *Phys. Rev.* **136 A**, 405 (1964).
- [200] P. A. Cundall, O. D. L. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique* **29**, 47 (1979).
- [201] P. A. Cundall, O. D. L. Strack, Modeling of microscopic mechanisms in granular material, in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [202] O. R. Walton, Particle-dynamics calculations of shear flow in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [203] P. K. Haff, B. T. Werner, Computer simulation of the mechanical sorting of grains, *Powder Technol.* **48**, 239 (1986).
- [204] O. R. Walton, R. L. Braun, R. G. Mallon, D. M. Cervelli, Particle-dynamics calculations of gravity flow of inelastic, frictional spheres, in: *Micromechanics of Granular Materials*, M. Satake, J. T. Jenkins (Hrsg.), Amsterdam 1988 (Elsevier).
- [205] O. R. Walton, Numerical simulation of inclined chute flows of monodisperse, inelastic, frictional spheres, in: *Advances in Micromechanics of Granular Materials*, H. H. Shen *et al.* (Hrsg.), Amsterdam 1992 (Elsevier).
- [206] Y. Zhang, C. S. Campbell, The interface between fluid-like and solid-like behaviour in two-dimensional granular flows, *J. Fluid Mech.* **237**, 541 (1992).
- [207] P. A. Thompson, G. S. Grest, Granular flow: Friction and the dilatancy transition, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1751 (1991).
- [208] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann, S. Sokołowski, Molecular dynamics simulation of powder fluidization in two dimensions, *Physica A* **189**, 437 (1992).
- [209] G. H. Ristow, Simulating granular flow with molecular dynamics, *J. Phys. I (France)* **2**, 649 (1992).
- [210] Y.-h. Taguchi, Powder turbulence: Direct onset of turbulent flow, *J. Phys. II* **2**, 2103 (1992).
- [211] T. Pöschel, Granular material flowing down an inclined chute: A molecular dynamics simulation, *J. Phys. II (France)* **3**, 27 (1993).
- [212] S. Melin, Wave propagation in granular assemblies, *Phys. Rev. E* **49**, 2353 (1994).

- [213] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, J. Duran, Onset of convection in molecular dynamics simulations of grains Phys. Rev. E **50**, R1762 (1994).
- [214] G. H. Ristow Particle mass segregation in a two-dimensional rotating drum, Europhys. Lett. **28**, 97 (1994).
- [215] Y.-h. Taguchi, H. Takayasu, Power law velocity fluctuations due to inelastic collisions in numerically simulated vibrated bed of powder, Europhys. Lett. **30**, 499 (1995).
- [216] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN – The Art of Scientific Computing*, Cambridge 1992² (Cambridge Univ. Press).
- [217] K. H. Hunt, F. R. E. Crossley, Coefficient of restitution interpreted as damping in vibroimpact, J. Appl. Mech. **42**, 440 (1975).
- [218] H. Goldstein, *Klassische Mechanik*, Wiesbaden 1989¹⁰ (Aula Verlag).
- [219] W. J. McNeil, W. G. Madden, A new method for the molecular dynamics simulation of hard core molecules, J. Chem. Phys. **76**, 6221 (1982).
- [220] M. Y. Louge, Computer simulations of rapid granular flows of spheres interacting with a flat, frictional boundary, Phys. Fluids A **6**, 2253 (1994).
- [221] J. Lee, Density waves in the flows of granular media, Phys. Rev. E **49**, 281 (1994).
- [222] O. R. Walton, Force models for particle-dynamics simulations of granular materials, in: *Mobile Particulate Systems*, E. Guazzelli, L. Oger (Hrsg.), Dordrecht 1995 (Kluwer).
- [223] Y. Tsuji, T. Tanaka, T. Ishida, Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, Powder Technol. **71**, 239 (1992).
- [224] J. Lee, H. J. Herrmann, Angle of repose and angle of marginal stability: Molecular dynamics of granular particles, J. Phys. A **26**, 373 (1993).
- [225] T. Pöschel, Recurrent clogging and density waves in granular material flowing through a narrow pipe, J. Phys. I (France) **4**, 499 (1994).
- [226] S. Melin, Simulation of sound propagation in granular media on the Connection Machine, Int. J. Mod. Phys. C **4**, 1103 (1993).
- [227] G. H. Ristow, H. J. Herrmann, Density patterns in two-dimensional hoppers, Phys. Rev. E **50**, R5 (1994).
- [228] C. Thornton, C. W. Randall, Applications of theoretical contact mechanics to solid particle system simulation, in: *Micromechanics of Granular Materials*, M. Satake, J. T. Jenkins (Hrsg.), Amsterdam 1988 (Elsevier).
- [229] Z. Ning, C. Thornton, Elastic-plastic impact of fine particles with a surface, in: *Powders and Grains 93*, C. Thornton (Hrsg.), Rotterdam 1993 (Balkema).
- [230] M. H. Sadd, Q. Tai, A. Shukla, Contact law effects on wave propagation in particulate materials using distinct element modeling, Int. J. Non-Linear Mechanics **28**, 251 (1993).

- [231] J. Schäfer, D. E. Wolf, Transients in homogeneous granular pipe flow, in: *Traffic and Granular Flow*, D. E. Wolf, M. Schreckenberg (Hrsg.), Singapur 1996 (World Scientific).
- [232] S. C. Cowin, W. J. Comfort III, Gravity-induced density discontinuity waves in sand columns, *J. Appl. Mech.* **49**, 497 (1982).
- [233] S. C. Cowin, Kinematic waves in vertical sand columns, in: *Mechanics of Granular Media – New Models and Constitutive Relations*, J. T. Jenkins, M. Satake (Hrsg.), Amsterdam 1983 (Elsevier).
- [234] J. Lee, M. Leibig, Density waves in granular flow: A kinetic wave approach, *J. Phys. I (France)* **4**, 507 (1994).
- [235] M. Leibig, Pattern-formation characteristics of interacting kinematic waves, *Phys. Rev. E* **49**, 184 (1994).
- [236] S. Chapman, T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge 1970³ (Cambridge Univ. Press).
- [237] R. M. Roberts, *Serendipity – Accidental Discoveries in Science*, New York 1989 (John Wiley).
- [238] O. R. Walton, Force models for particle-dynamics simulations of granular materials, Vortrag auf dem NATO ASI „Mobile Particulate Systems“, Juli 1994, Cargèse, Frankreich.
- [239] S. Toyama, The flow of granular materials in moving beds, *Powder Technol.* **4**, 214 (1970/71).
- [240] H. Takahashi, H. Yanai, Flow profile and void fraction of granular solids in a moving bed, *Powder Technol.* **7**, 205 (1973).
- [241] Tim Scheffler, Diplomarbeit, Universität Duisburg (in Vorbereitung).
- [242] W. Leutzbach, *Introduction to the Theory of Traffic Flow*, Berlin 1988 (Springer).
- [243] K. L. Schick, A. A. Verveen, $1/f$ noise with a low frequency white noise limit, *Nature* **251**, 599 (1974).
- [244] G. W. Baxter, R. P. Behringer, T. Fagert, G. A. Johnson, Pattern formation in flowing sand, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2825 (1989).
- [245] T. Raafat, J. P. Hulin, H. J. Herrmann, Density waves in dry granular media falling down in a pipe, *Phys. Rev. E*, erscheint 1996.
- [246] X.-l. Wu, K. J. Måløy, A. Hansen, M. Ammi, D. Bideau, Why hour glasses tick, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1363 (1993).
- [247] M. J. Lighthill, G. B. Whitham, On kinematic waves: I. Flood movement in long rivers, II. A theory of traffic flow on long crowded roads, *Proc. Roy. Soc. A* **229**, 281 (1955).
- [248] I. Prigogine, R. Herman, *Kinetic Theory of Vehicular Traffic*, New York 1971 (American Elsevier).

- [249] R. Kühne, Verkehrsablauf auf Fernstraßen, *Phys. Bl.* **47**, 201 (1991).
- [250] O. Biham, A. A. Middleton, D. Levine, Self-organization and a dynamical transition in traffic-flow models, *Phys. Rev. A* **46**, R6124 (1992).
- [251] K. Nagel, M. Schreckenberg, A cellular automaton model for freeway traffic, *J. Phys. I (France)* **2**, 2221 (1992).
- [252] K. Nagel, Life times of simulated traffic jams, *Int. J. Mod. Phys. C* **5**, 567 (1994).
- [253] B. S. Kerner, P. Konhäuser, Structure and parameters of clusters in traffic flow, *Phys. Rev. E* **50**, 54 (1994).
- [254] D. Helbing, Improved fluid-dynamical model for vehicular traffic, *Phys. Rev. E* **51**, 3164 (1994).

Jül-3214
März 1996
ISSN 0944-2952